$$+\left[C'_{v_3}e^{-t_2 s}+\frac{C_7 \cdot C_{v_3} C_{11}}{(sV_s+q_{B_1})\left(1-\frac{C_4\, C_{11}}{sV_s+q_{B_1}}\, e^{-(t_1)s}\right)}\, e^{-(t_1+t_2)s}\right] Q_{v_3}(s)+$$

$$+\frac{C_{v_4}\cdot C_{31}}{sV_a+q_{B_2}}\, e^{-t_2 s}\, Q_{v_4}(s) \tag{26}$$

Destas equações resultam as seguintes funções de transferência, elementos da matriz P:

$$P_{11}(s)=\frac{Y_1(s)}{Q_{v_1}(s)}=\frac{\dfrac{C_{v_1} C_{11}\, e^{-t_1 s}}{sV_s+q_{B_1}}}{1-\dfrac{C_4\, C_{11}}{sV_s+q_{B_1}}\, e^{-t_1 s}-\dfrac{C_5\cdot C_7}{1-\dfrac{C_6\, C_{11}}{sV_a+q_{B_2}}\, e^{-t_2 s}}\, e^{-(t_1+t_2)s}} \tag{27}$$

$$P_{12}(s)=\frac{Y_1(s)}{Q_{v_2}(s)}=\frac{C_{v_2}\, e^{-t_1 s}+\dfrac{C_5\cdot C'_{v2}\, C_{31}\cdot e^{-(t_1+t_2)s}}{\left(1-\dfrac{C_6\, C_{11}}{sV_a+q_{B_2}}\, e^{-t_2 s}\right)(sV_a+q_{B_2})}}{1-\dfrac{C_4\, C_{11}}{sV_s+q_{B_1}}\, e^{-t_1 s}-\dfrac{C_5\, C_7}{1-\dfrac{C_6\, C_{11}}{sV_a+q_{B_2}}\, e^{-t_2 s}}\, e^{-(t_1+t_2)s}} \tag{28}$$

$$P_{13}(s)=\frac{Y_1(s)}{Q_{v_3}(s)}=\frac{\dfrac{C_{v_3}\, C_{11}}{sV_s+q_{B_1}}\, e^{-t_1 s}+\dfrac{C_5\, C'_{v3}}{1-\dfrac{C_6\, C_{11}}{sV_a+q_{B_2}}\, e^{-t_2 s}}\, e^{-(t_1+t_2)s}}{1-\dfrac{C_4\, C_{11}}{sV_s+q_{B_1}}\, e^{-t_1 s}-\dfrac{C_5\, C_7}{1-\dfrac{C_6\, C_{11}}{sV_a+q_{B_2}}\, e^{-t_2 s}}\, e^{-(t_1+t_2)s}} \tag{29}$$

$$P_{14}(s)=\frac{Y_1(s)}{Q_{v_4}(s)}=\frac{\dfrac{C_5\, C_{v_4}\, C_{31}}{s(V_a+q_{B_2})}\,\dfrac{1}{\left(1-\dfrac{C_6\, C_{11}}{sV_a+q_{B_2}}\, e^{-t_2 s}\right)}\, e^{-(t_1+t_2)s}}{1-\dfrac{C_4\, C_{11}}{sV_s+q_{B_1}}\, e^{-t_1 s}-\dfrac{C_5\, C_7}{1-\dfrac{C_6\, C_{11}}{sV_a+q_{B_2}}\, e^{-t_2 s}}\, e^{-(t_1+t_2)s}} \tag{30}$$

$$P_{31}(s) = \frac{Y_3(s)}{Q_{v_1}} = \frac{\dfrac{C_{v_1} C_{11} C_7}{sV_s + q_{B_1}} \cdot \dfrac{1}{1 - \dfrac{C_4 C_{11}}{sV_s + q_{B_1}} e^{-t_1 s}} \cdot e^{-(t_1 + t_2)s}}{1 - \dfrac{C_6 C_{11}}{sV_a + q_{B_2}} e^{-t_2 s} - \dfrac{C_7 C_5}{1 - \dfrac{C_4 C_{11}}{sV_s + q_{B_1}} e^{-t_1 s}} e^{-(t_1 + t_2)}} \tag{31}$$

$$P_{32}(s) = \frac{Y_3(s)}{Q_{v_2}(s)} = \frac{\dfrac{C'_{v_2} \cdot C_{31}}{sV_a + q_{B_2}} e^{-t_2 s} + \dfrac{C_7 C_{v_2}}{1 - \dfrac{C_4 C_{11}}{sV_s + q_{B_1}} e^{-t_1 s}} e^{-(t_1 + t_2) s}}{1 - \dfrac{C_6 C_{11}}{sV_a + q_{B_2}} e^{-t_2 s} - \dfrac{C_7 C_5}{1 - \dfrac{C_4 C_{11}}{sV_s + q_{B_2}} e^{-t_1 s}} e^{-(t_1 + t_2) s}} \tag{32}$$

$$P_{33}(s) = \frac{Y_3(s)}{Q_{v_3}(s)} = \frac{C'_{v_3} e^{-t_2 s} + \dfrac{C_7 C_{v_3} C_{11}}{(sV_s + q_{B_1}) \left(1 - \dfrac{C_4 C_{11}}{sV_s + q_{B_1}} e^{-t_1 s}\right)} e^{-(t_1 + t_2) s}}{1 - \dfrac{C_6 C_{11}}{sV_a + q_{B_2}} e^{-t_2 s} - \dfrac{C_7 C_5}{1 - \dfrac{C_4 C_{11}}{sV_s + q_{B_1}} e^{-t_1 s}} e^{-(t_1 + t_2) s}} \tag{33}$$

$$P_{34}(s) = \frac{Y_3(s)}{Q_{v_4}(s)} = \frac{\dfrac{C_{v_4} C_{31}}{sV_a + q_{B_2}} e^{-t_2 s}}{1 - \dfrac{C_6 C_{11}}{sV_a + q_{B_2}} e^{-t_2 s} - \dfrac{C_7 C_5}{1 - \dfrac{C_4 C_{11}}{sV_s + q_{B_1}} e^{-t_1 s}} e^{-(t_1 + t_2) s}} \tag{34}$$

Estamos, finalmente, em condições de estabelecer o tipo de matriz de transferência P, conforme pretendíamos. Assim, temos:

$$P(s) = [P_{ij}(s)] \tag{35}$$

onde P_{ij} com i, j = 1, 2, 3, 4, são dados pelas expressões deduzidas atrás (8), (10), (12) e (27) a (34).

(Continua)

OS SERVIÇOS DE ASSISTÊNCIA

DA S.T.E.T.

PROTEGEM O SEU INVESTIMENTO EM MÁQUINAS CATERPILLAR. A protecção começa pelos nossos delegados de vendas, devidamente especializados e aptos a escolher as máquinas Caterpillar e os acessórios que melhor convenham às necessidades do seu trabalho. O rendimento dessas máquinas é garantido pela nossa Secção de Serviço, que executa reparações de qualidade, ràpidamente, nas nossas oficinas devidamente equipadas. Quando é necessária uma reparação de emergência, os nossos mecânicos especializados deslocam-se ao local de trabalho dos Clientes. Em suma, a nossa organização oferece aos Clientes todas as possibilidades de exploração económica dos seus equipamentos, por meio de programas de manutenção preventiva.
E mais, podemos satisfazer quase todas as encomendas de peças Caterpillar no mesmo dia em que são recebidas.

O seu melhor investimento é a aquisição de máquinas Caterpillar... a melhor protecção desse investimento é a organização de assistência da

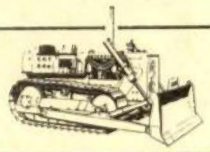
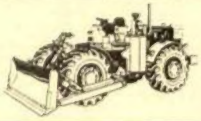
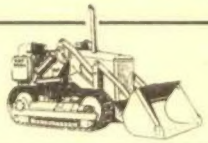
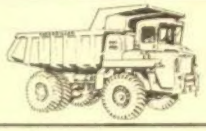
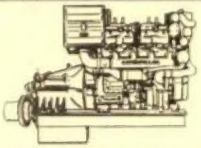
S.T.E.T.

SOCIEDADE TÉCNICA DE EQUIPAMENTOS E TRACTORES, S. A. R. L.

PRIOR VELHO (SACAVÉM) · PORTO · BEJA

Caterpillar e Cat são marcas registadas de Caterpillar Tractor Co.

▪ A mais completa linha de equipamentos para terraplenagem...
▪ A mais completa linha de motores Diesel...

TRACTORES DE RASTO	6 modelos de 65 a 385 HP ao volante	
MOTONIVELADORAS	6 modelos de 80 a 222 HP ao volante	
MOTORSCRAPERS	9 modelos de 300 a 900 HP ao volante	
BULLDOZERS DE RODAS	2 modelos de 300 a 400 HP ao volante	
PÁS CARREGADORAS DE RASTO	4 modelos de 60 a 150 HP ao volante	
PÁS CARREGADORAS DE RODAS	6 modelos de 80 a 300 HP ao volante	
CAMIÃO DE ESTALEIRO	400 HP ao volante	
MOTORES MARÍTIMOS	19 modelos de 45 a 1 125 HP	
MOTORES INDUSTRIAIS	18 " " 7 a 1 125 HP	
GRUPOS ELECTROGÉNEOS	19 " " 31 a 812 KVA	
MOTORES PARA CAMIÃO	7 " " 145 a 375 HP	

À
S.T.E.T.
Apartado 1351 – Lisboa

TEC

Desejo receber (SEM COMPROMISSO DA MINHA PARTE):

- ☐ Literatura sobre equipamentos **CATERPILLAR**
  Indicar os modelos _____
- ☐ Literatura sobre motores **CATERPILLAR**
  Indicar os modelos _____
- ☐ A visita de um Delegado de Vendas

NOME OU FIRMA _____
PROFISSÃO OU ACTIVIDADE _____
ENDEREÇO _____

CATERPILLAR

Caterpillar, Cat e Traxcavator são Marcas Registadas da Caterpillar Tractor Co.

RECORTE ESTE CUPÃO E ENVIE-O À S.T.E.T. SEM DEMORA

SOCIEDADE TÉCNICA DE EQUIPAMENTOS E TRACTORES, S. A. R. L.
PRIOR VELHO (SACAVÉM) • PORTO • BEJA

C. D. U. 627.821.043 [691.32

BARRAGEM EM BETÃO
ESTUDO DA DIRECTRIZ DUM ARCO

por JOSÉ VALENTE DA SILVA
Engenheiro Civil

RESUMO

Apresenta-se um método de cálculo aproximado, permitindo determinar o estado de tensão em arcos de barragens.

Indicam-se, seguidamente, alguns caminhos com o fim de determinar a solicitação aconselhável, para dado arco, na medida em que sejam satisfeitas condições, para tanto, prèviamente impostas.

Assim, ao ser conhecida a forma dum arco e principalmente a sua directriz, é possível ter uma ideia da carga que esse arco pode suportar, de acordo com a segurança consentida pelas restrições formuladas.

SYNOPSIS

An approximate design method allowing the determination of the state of stress in dam arches is presented.

Ways permitting the determination of the advisable load for a given arch, taking into account previously imposed conditions, are then described.

Thus, the shape of the arch and mainly its directrix being known, it is possible to have an idea of the load the arch can support, according to the safety allowed by the imposed restritions.

1 — INTRODUÇÃO

O estudo da directriz mais aconselhável para determinado arco duma barragem, é fundamental se se quiser obter um bom comportamento estrutural.

Se é verdade que as tracções verticais podem, em geral e sem demasiado aumento de custo, ser eliminadas mediante adequado aumento de espessura, no caso das tracções horizontais o problema apresenta-se diferente, pois só modificando os eixos dos arcos se conseguem reduzir eficazmente.

Um estudo, embora aproximado, permitindo uma escolha mais racional, ao pretender definir a directriz dum arco, seria sem dúvida de interesse.

É, pois, dentro deste espírito que se apresenta este trabalho.

2 — PROBLEMAS A RESOLVER

1.º — Estudo da directriz dada a solicitação exterior.

2.º — Estudo da solicitação mais conveniente para dada directriz.

Em qualquer destas hipóteses há que definir um critério que oriente na pesquisa dos valores óptimos das grandezas em estudo.

Assim, por exemplo, a solicitação mais conveniente, se for definida como aquela que não provoca tracções, será uma carga nula e, então, este critério revela-se insuficiente.

Se for definida como a solicitação que, não provocando tracções, origina, em cada ponto em estudo, a maior tensão de compressão admissível, já o critério é outro.

Enfim, o critério, a sua formulação, presume que se sabe o que mais interessa. É pois, uma questão prévia.

3 — PRINCIPAIS DADOS

Como dados principais tem-se: a corda do arco, a sua espessura e a carga que suporta, para resolver problemas do primeiro tipo; no outro caso, 2.º problema, será necessária a definição analítica do arco. A eliminação de tracções nas nascenças dos arcos depende, em geral, das possibilidades, oferecidas pelo terreno, à inserção da barragem. O ângulo de inserção, parâmetro a que normalmente se recorre, pode, pois, aparecer, como mais um dado do primeiro problema.

4 — ESTADO DE TENSÃO

4.1 — Para a resolução de qualquer dos problemas enunciados torna-se necessário poder

calcular um arco, entendendo-se por isso a determinação do seu estado de tensão.

Recorrer-se-á a um método aproximado que, no entanto, se afigura suficientemente preciso.

A primeira simplificação a fazer consiste em admitir o arco como sendo um conjunto de elementos estruturais rectilíneos. Assim a estrutura a calcular será constituída por um conjunto de vigas.

Para facilitar a exposição chamar-se-á nó ao ponto de cruzamento de duas vigas, entendendo-se por elementos desequilibrados as acções sobre esse nó das vigas que o definem; então, sendo três os graus de liberdade de cada um, serão três os elementos desequilibrados correspondentes.

Sem apresentar as expressões que permitem calcular esses elementos indica-se, sucintamente, o caminho seguido na determinação do estado de tensão.

Ao quadro junto, que seguidamente se analisa, chamar-se-á quadro de relaxação do nó *N*.

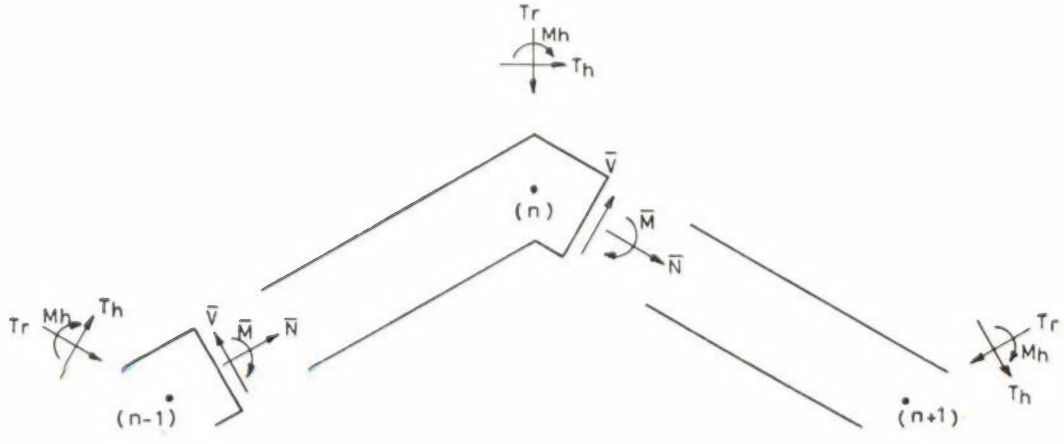
Como se verifica, relativamente a cada nó, são 45 coeficientes que têm de ser calculados.

Repare-se, entretanto, que, no caso de arcos circulares se as vigas tiverem comprimentos iguais e o arco for de espessura constante, o quadro é o mesmo qualquer que seja o nó, desde que não se refira à fundação.

Antes de indicar o significado dos coeficientes apresentados veja-se o valor dos símbolos $\overline{V}$, $\overline{N}$ e $\overline{M}$ que, conforme o esquema, são, respectivamente: o esforço transverso, o esforço axial e o momento na secção duma viga, junto ao nó a que se referem.

Sendo já possível compreender o significado dos coeficientes têm-se, por exemplo, que: C_2 dá o elemento desequilibrado T_r que se cria no nó (n) quando aí se anula $T_h = 1$, da mesma forma C_{30} dá o valor de $\overline{V}$ no nó (n-1), quando se anula, em (n), $M_h = 1$, e assim sucessivamente.

Nó		T_r	T_h	M_h
N	T_r	C_1	C_2	C_3
	T_h	C_4	C_5	C_6
	M_h	C_7	C_8	C_9
N	$\overline{V}$	C_{10}	C_{11}	C_{12}
	$\overline{N}$	C_{13}	C_{14}	C_{15}
	$\overline{M}$	C_{16}	C_{17}	C_{18}
N − 1	T_r	C_{19}	C_{20}	C_{21}
	T_h	C_{22}	C_{23}	C_{24}
	M_h	C_{25}	C_{26}	C_{27}
N − 1	$\overline{V}$	C_{28}	C_{29}	C_{30}
	$\overline{N}$	C_{31}	C_{32}	C_{33}
	$\overline{M}$	C_{34}	C_{35}	C_{36}
N + 1	T_r	C_{37}	C_{38}	C_{39}
	T_h	C_{40}	C_{41}	C_{42}
	M_h	C_{43}	C_{44}	C_{45}

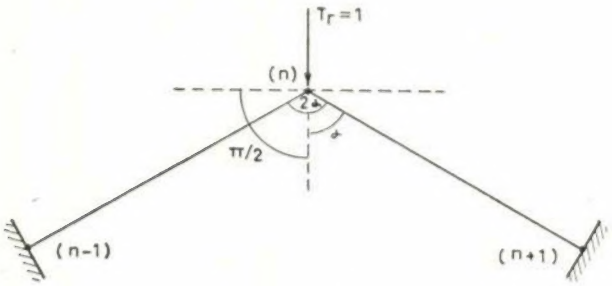


É evidente e fácil, na mesma ordem de ideias, verificar que: $C_1 = C_5 = C_3 = 0$.

Como imediatamente se depreende, este processo de cálculo enquadra-se nos métodos de relaxação usados ao estudar estruturas reticuladas. A forma que se lhe deu resultou, antes de mais, duma tentativa de simplificação do cálculo dos coeficientes.

Como nos arcos de barragens o efeito dos esforços transversos na deformabilidade da estrutura se afigura relevante, resulta que, ao deduzir as expressões dos coeficientes, se deve atender, não só aos momentos e esforços axiais, como também àqueles. Os sistemas hiperestáticos, que para tanto é necessário resolver, são três: um para cada elemento desequilibrado.

Assim, relativamente a $T_r = 1$, há que resolver o sistema indicado no esquema:



tendo o (n) apenas um grau de mobilidade; o do sentido da força T_r. A solicitação exterior é a acção sobre o nó, isto é, $T_r = 1$.

Semelhantemente se consideram os elementos T_h e M_h, devendo em relação a T_h dar-se liberdade ao nó na direcção da própria força, perpendicular à primeira.

Da solução de cada sistema obtêm-se, pois, 15 coeficientes, a saber:

— as acções que resultam nos nós (n), (n — 1) e (n + 1),
— e os valores de $\overline{V}$ $\overline{N}$ e $\overline{M}$ nos nós (n) e (n — 1)

Estes são, com efeito, os coeficientes necessários, uma vez que se pretende conhecer o estado de tensão em tantos pontos quantos os nós.

A determinação dos valores iniciais de T_r, T_h, M_h, $\overline{V}$, $\overline{N}$ e $\overline{M}$, para cada nó, obtêm-se fàcilmente, pois resultam do cálculo duma viga rectilínea encastrada nos extremos. A solicitação exterior será a carga que actua sobre o arco, na zona da viga em estudo.

Calculam-se, assim, as acções dessa viga sobre os seus apoios bem como os valores de $\overline{V}$, $\overline{N}$ e $\overline{M}$ correspondentes. Estes três últimos serão designados por $\overline{V}_o$, $\overline{N}_o$ e $\overline{M}_o$ e os valores iniciais de T_r T_h e M_h, em cada nó, são, no fim de contas, as acções sobre ele, das vigas que o definem, calculadas em determinado referencial.

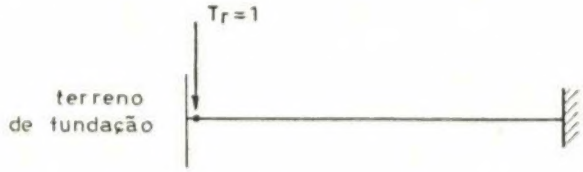
Nesta altura, algumas simplificações devem ser introduzidas.

Com efeito, se o número de nós não é muito reduzido, poder-se-á, para o cálculo dos elementos iniciais, supor as vigas de espessura constante e esta mesma simplificação também parece de admitir no caso do cálculo dos coeficientes embora, em casos mais desfavoráveis, sem tanta legitimidade.

Procedendo assim, tanto o cálculo destes últimos como o dos valores inciais referidos se simplifica imenso.

O processo indicado para o cálculo dos coeficientes não resolve o problema quando o nó se situa na nascença do arco, junto à fundação. Verificando-se este caso, quando se não considera o arco como encastrado, o que é usual admitir-se no cálculo de arcos de barragens, há que atender às particularidades próprias da questão.

O problema é, no entanto, semelhante.



Por exemplo, para o caso de $T_r = 1$, a resolução do sistema hiperestático não oferece dificuldades, admitindo, como é hábito, que a deformação da fundação se efectiva conforme a teoria de Vogt prevê.

Está-se agora em posição para considerar o equilíbrio de todo o sistema.

Então, calculados os elementos iniciais, podem-se admitir 2 hipóteses:

— serem ou não serem nulos os elementos desequilibrados.

Se forem nulos, hipótese muito improvável e sem interesse, o estado de tensão aproximado é

traduzido pelos valores de $\overline{N}_o$, $\overline{V}_o$ e $\overline{M}_o$, que certamente serão iguais a zero.

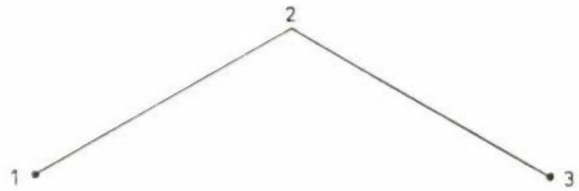
No outro caso, não sendo nulos os valores das acções iniciais sobre os nós, há que os anular. O estado de tensão final resultará da soma dos valores iniciais — $\overline{N}_o$, $\overline{V}_o$ e $\overline{M}_o$ — aos valores correspondentes, resultantes da anulação dessas acções.

Um processo que logo surge é ir anulando sucessivamente cada um dos elementos desequilibrados, por uma certa ordem, até chegar a valores suficientemente pequenos que, em face da precisão imposta, se possam desprezar.

Esta maneira de proceder presume a convergência do processo, que se aceita sabendo que o problema tem uma solução e que, de cada vez que se dá liberdade ao sistema, este se aproxima dela.

Entretanto, nos exemplos assim calculados verificou-se uma convergência demasiado lenta levando a evitar a resolução por este método, pondo o problema de maneira diferente, como a seguir se indica.

Admita-se, por simplicidade, o caso concreto esquemàticamente representado



e, relativamente a ele, as matrizes seguintes, representando o índice superior de qualquer dos seus elementos o nó a que estes últimos se referem.

$$[A] = \begin{bmatrix} C_1^1 & C_2^1 & C_3^1 & C_{19}^2 & C_{20}^2 & C_{21}^2 & & & \\ C_4^1 & C_5^1 & C_6^1 & C_{22}^2 & C_{23}^2 & C_{24}^2 & & & \\ C_7^1 & C_8^1 & C_9^1 & C_{25}^2 & C_{26}^2 & C_{27}^2 & & & \\ C_{37}^1 & C_{38}^1 & C_{39}^1 & C_1^2 & C_2^2 & C_3^2 & C_{19}^3 & C_{20}^3 & C_{21}^3 \\ C_{40}^1 & C_{41}^1 & C_{42}^1 & C_4^2 & C_5^2 & C_6^2 & C_{22}^3 & C_{23}^3 & C_{24}^3 \\ C_{43}^1 & C_{44}^1 & C_{45}^1 & C_7^2 & C_8^2 & C_9^2 & C_{25}^3 & C_{26}^3 & C_{27}^3 \\ & & & C_{37}^2 & C_{38}^2 & C_{39}^2 & C_1^3 & C_2^3 & C_3^3 \\ & & & C_{40}^2 & C_{41}^2 & C_{42}^2 & C_4^3 & C_5^3 & C_6^3 \\ & & & C_{43}^2 & C_{44}^2 & C_{45}^2 & C_7^3 & C_8^3 & C_9^3 \end{bmatrix} \qquad [T] = \begin{bmatrix} T_r^1 \\ T_h^1 \\ M_h^1 \\ T_r^2 \\ T_h^2 \\ M_h^2 \\ T_r^3 \\ T_h^3 \\ M_h^3 \end{bmatrix}$$

Como se verifica os elementos da matriz [A] são os coeficientes do quadro de relaxação relativos aos elementos desequilibrados; os da Matriz [T] são as acções iniciais sobre os nós.

Efectuando o produto [A] [T] = $[T_1]$ os elementos da matriz $[T_1]$ são novas acções sobre os nós, resultantes de em cada um se terem anulado ùnicamente os elementos desequilibrados iniciais.

Repetindo indefinidamente o processo, considerando de cada vez as acções dadas pelo produto matricial anterior, a matriz $[X] = [T] + [T_1] + [T_2] + \ldots\ldots\ldots\ldots$ dá a totalidade das acções que, em cada nó, foi preciso anular.

Substituindo as sucessivas matrizes $[T_i]$ na expressão de [X] vem:

$$[X] = ([1] + [A] + [A]^2 + [A]^3 + \ldots)\ [T]$$

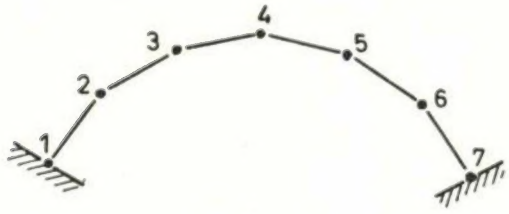
ou

$$[X] = \frac{([1] - [A]^{\infty})}{[1] - [A]} [T]$$

dado que a expressão dentro do parêntesis é uma soma de termos em progressão geométrica.

Sendo $[A]^{\infty} = 0$, pois que já atrás se viu existir convergência, vem:

$$([1] - [A])[X] = [T] = [B][X]$$



1

Quer dizer, podem obter-se os valores de

$$X_1^1, X_2^1, X_3^1, X_1^2, X_2^2, X_3^2, \ldots\ldots\ldots\ldots$$

resolvendo o sistema anterior.

Finalmente têm-se os esforços, definindo o estado de tensão:

$$\overline{V}'^n = \overline{V}_0^n + C_{10}^n . X_1^n + C_{11}^n . X_2^n + C_2^n . X_3^n + C_{28}^{n+1} . X_1^{n+1} + C_{29}^{n+1} . X_2^{n+1} + C_{30}^{n+1} . X_3^{n+1}$$

$$\overline{N}'^n = \overline{N}_0^n + C_{13}^n X_1^n + {}_{14}C X_2^n + C_{15}^n X_3^n + C_{31}^{n+1} X_1^{n+1} + C_{32}^{n+1} . X_2^{n+1} + C_{33}^{n+1} X_3^{n+1}$$

$$M = \overline{M}_0^n + C_{16}^n X_1^n + C_{17}^n X_2^n + C_{18}^n X_3^n + C_{34}^{n+1} X_1^{n+1} + C_{35}^{n+1} . X_2^{n+1} + C_{31}^{n+} X_3^{n+1}$$

$$N^n = \overline{N}'^n \text{ sen } \alpha_n + \overline{V}'^n \cos \alpha_n$$

$$V^n = -\overline{N}'^n \cos \alpha_n + \overline{V}'^n \text{ sen } \alpha_n$$

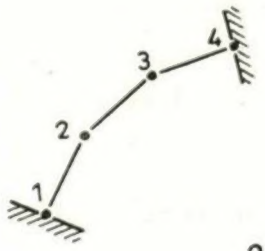
Se for N o último ponto lembra-se que os valores relativos ao ponto N + 1 são nulos.

Pretende-se salientar, ainda, que o sistema $[T] = [B][X]$ poderia obter-se directamente, considerando o equilíbrio final de cada nó, ou seja, acções finais nulas.

4.2 — Arco simétrico

Neste caso o problema pode ser tratado de forma semelhante, considerando apenas metade do arco.

Assim, reduzindo, por haver simetria, o estudo do arco 1 ao estudo do arco 2,



2

é necessário, como se vê fàcilmente, atender às alterações:

1.ª) — Sendo o nó 4 o do fecho do arco, alteram-se os seguintes coeficientes do quadro de relaxação do nó 3.

$$C'_{37} = 2 . C_{37} \quad C'_{38} = 2 . C_{38} \quad C'_{39} = 2 . C_{39}$$

$$C'_{41} = C'_{42} = C'_{43} = C'_{44} = C'_{45} = 0$$

2.ª) — Para efeitos de cálculo dos elementos iniciais, no nó de fecho, deve considerar-se, ainda, o efeito da viga (4-5), simétrica em relação a (3-4).

3.ª) — Para determinar os esforços no fecho é preciso calcular o sistema isostático seguinte:

isto é, considerar a viga (3-4) encastrada em 4 e solicitada pela carga exterior e pelos esforços em 3, já conhecidos.

Sendo admissíveis as simplificações feitas o esforço transverso em 4 deve ser pràticamente nulo.

5 — DESLOCAMENTOS

Os deslocamentos dos nós dos arcos podem ser obtidos, ràpidamente, a partir de valores anteriores.

Sabe-se que, na sequência do cálculo dos coeficientes do quadro de relaxação, referido a dado nó, está implícito um deslocamento desse nó, de acordo com o sentido da acção a anular.

Se para $T_r^n = 1$ esse deslocamento for Ek_r^n vem, para deslocamento final:

$$E \quad d_r^n = E\, k_r^n\, X_1^n \text{ e, de forma análoga,}$$

$$E \quad d_h^n = E\, k_h^n\, X_2^n\,,$$

$$E \quad d_\alpha^n = E\, k_\alpha^n\, X_3^n\,,$$

para as outras duas acções a anular.

6 — ESTUDO DA DIRECTRIZ, DADA A SOLICITAÇÃO EXTERIOR

Supondo dada uma lei de variação de espessuras, bem como a carga exterior, o problema a resolver consiste na determinação da directriz de tal forma que os valores dos esforços sejam aqueles que, dentro do possível, satisfaçam as condições traduzindo o melhor comportamento da estrutura.

Compreende-se que, mediante alterações judiciosamente ordenadas, dos ângulos formados pelas barras, seja possível obter formas que sucessivamente mais se aproximem da que eventualmente satisfaz as condições impostas. Existe, porém, um inconveniente: a extensão dos cálculos.

Assim, por exemplo, se a condição exigir que seja mínima a soma dos quadrados dos momentos nos pontos em estudo, mesmo só com esta condição, seria preciso, além de calcular, de cada vez, os valores dos elementos iniciais e dos coeficientes do nó que se alterou, resolver, ainda, um sistema, calcular os momentos e em seguida a soma dos seus quadrados para ser comparada com a anteriormente obtida.

Pondo o problema com objectivos imediatos diferentes é possível evitar, em grande parte, este inconveniente.

7 — ESTUDO DA SOLICITAÇÃO MAIS CONVENIENTE PARA DADA DIRECTRIZ

Agora sendo completamente definido o arco, é também definida a matriz [B] e assim: $[X] = [B]^{-1}\,[T]$.

Quer dizer, invertida a matriz [B] e conhecida a dos elementos desequilibrados, podem-se ter os valores de $(M^n - M_o^n)$.

Supondo, agora, que a carga varia linearmente de nó para nó é fácil verificar que os elementos iniciais podem ser traduzidos por expressões lineares dos valores das cargas nos nós.

Sendo $H_1, H_2 \ldots H_n$ esses valores resulta:

$$\begin{aligned}
T_r^1 &= a_1^1\, H_1 + b_1^2\, H_2 \\
T_h^1 &= a_2^1\, H_1 + b_2^2\, H_2 \\
M_h^1 &= a_3^1\, H_1 + b_3^2\, H_2 \\
T_r^2 &= c_1^1\, H_1 + a_1^2\, H_2 + b_1^3\, H_3 \\
T_h^2 &= c_2^1\, H_1 + a_2^2\, H_2 + b_2^3\, H_3 \\
M_h^2 &= c_3^1\, H_1 + a_3^2\, H_2 + b_3^3\, H_3 \\
T_r^3 &= \qquad\quad c_1^2\, H_2 + a_1^3\, H_3 + b_1^4\, H_4 \\
T_h^3 &= \qquad\quad c_2^2\, H_2 + a_2^3\, H_3 + b_2^4\, H_4 \\
M_h^3 &= \qquad\quad c_3^2\, H_2 + a_3^3\, H_3 + b_3^4\, H_4 \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots
\end{aligned}$$

ou

$$[T] = [C]\,[H]$$

e

$$[X] = [B]^{-1}\,[C]\,[H]$$

ou ainda, efectuando o produto $[B]^{-1}\,[C] = [D_1]$,

$$[X] = [D_1]\,[H]$$

É fácil verificar que cada coluna da matriz $[D_1]$ dá os valores de [X] para a carga $H = 1$ correspondente a essa coluna, sendo os restantes valores de H todos nulos, isto é, dá-nos os valores de [X] para uma carga triangular unitária com vértice no nó respectivo.

Os esforços iniciais podem, de forma análoga aos elementos desequilibrados, ser expressos por uma matriz.

Sendo [Y] essa matriz onde

$$Y_1 = \overline{T}_{r_o}^1 \qquad Y_2 = \overline{T}_{h_o}^1 \quad \ldots\ldots$$

será:

$$[Y] = [C_1]\,[H]\,,$$

sendo $[C_1]$ a matriz que traduz as expressões-lineares dos esforços iniciais em função das cargas exteriores.

Ainda, sempre de forma semelhante, se podem representar os elementos finais. Sendo [Z] a matriz dos esforços finais é:

$$[Z] = [C_1]\ [H] + [C_2]\ [X]$$

ou

$$[Z] = ([C_1] + [C_2]\ [B]^{-1}\ [C])\ [H]$$

Sendo

$$[C_2] = \begin{bmatrix} C^1_{10}\ C^1_{11}\ C^1_{12}\ C^2_{28}\ C^2_{29}\ C^2_{30} \\ C^1_{13}\ C^1_{14}\ C^1_{15}\ C^2_{31}\ C^2_{32}\ C^2_{33} \\ C^1_{16}\ C^1_{17}\ C^1_{18}\ C^2_{34}\ C^2_{35}\ C^2_{36} \\ C^2_{10}\ C^2_{11}\ C^2_{12}\ C^3_{28}\ \ldots \\ C^2_{13}\ C^2_{14}\ C^2_{15}\ C^3_{31}\ \ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \end{bmatrix}$$

A expressão matricial anterior diz que os esforços são funções lineares das cargas triangulares e dá uma expressão para os calcular.

Efectuando as operações dentro do parêntesis, vem:

$$[C_1] + [C_2]\,[B]^{-1}\ [C] = [D]$$

e,

$$[Z] = [D]\ [H]$$

Vê-se, assim, que cada linha da matriz [D] dá os coeficientes de influência dos esforços para cada uma das posições de carga triangular.

Quanto aos deslocamentos já se viu que eram calculados conhecendo [X] e os valores dos KK correspondentes. Resulta, por isso, que, a menos certas constantes de proporcionalidade conhecidas, os deslocamentos são dados pela matriz [X].

Assim, os elementos de cada linha da matriz

$$[D_1] = [B]^{-1}\ [C]$$

são, a certa escala, os coeficientes de influência do tipo de deslocamento no nó a que essa linha diz respeito.

Supondo agora que as condições impostas obrigam, além da restrição que se segue, a que a soma dos quadrados dos momentos seja mínima, o problema que se põe — mínimos condicionados — pode ser fàcilmente resolvido.

Com efeito, suponha-se o condicionamento seguinte:

$$S = H_1 + H_2 + H_3 + \ldots\ldots + H_n$$

sendo o valor de S fixado à priori.

Viu-se que

$$[Z] = [D]\ [H]$$

ou

$$Z_1 = d_{11}\,H_1 + d_{12}\,H_2 + d_{13}\,H_3 \ldots\ldots + d_{1n}\,H_n$$

$$Z_2 = d_{21}\,H_1 + d_{22}\,H_2 + \ldots\ldots\ldots\ldots$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

$$Z_{3n} = d_{3n,1}\,H_1 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

Então, de acordo com a nomenclatura usada, Z_3, Z_6, ... Z_{3n} são momentos que, para facilitar, serão representados por

$$M_1 = r_{11}\,H_1 + r_{12}\,H_2 + \ldots r_{1n}\,H_n$$

$$M_2 = r_{21}\,H_1 + r_{22}\,H_2 + \ldots$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

$$M_n = r_{n1}\,H_1 + \ldots\ldots\ldots\ldots$$

ou sintèticamente:

$$M_i = \sum_{j=1}^{n} r_{ij} \cdot H_j$$

$$i, j = 1, n$$

ou ainda $[M] = [R]\ [H]$

Daí, vem: $\sum_{i=1}^{n} M_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (\sum_{j=1}^{n} r_{ij}\ H_j)^2$,

que se pretende minimizar.

Formando para tanto a expressão auxiliar

$$U = \sum_{i=1}^{n} M_i^2 + \gamma\ (S - \sum_{j=1}^{n} H_j)$$

e derivando sucessivamente em ordem a cada uma das incógnitas e em ordem a γ, vem:

$$\sum_{i=1}^{n} r_{it} \sum_{j=1}^{n} r_{ij}\ H_j - \frac{\gamma}{2} = 0$$

$$t, i, j = 1, n$$

ou

$$\sum_{j=1}^{n} H_j \sum_{i=1}^{n} r_{it} \cdot r_{ij} + \lambda = 0, \quad \text{com } \lambda = -\frac{\gamma}{2}$$

sendo, por hipótese

$$\sum_{j=1}^{n} Hj = S$$

ou seja, um sistema de $n+1$ equações a $n+1$ incógnitas que resolvido dá os valores de H_j satisfazendo às condições impostas.

Repare-se que os elementos, do determinante principal do sistema, dados pela expressão:

$$\sum_{i=1}^{n} r_{it} \cdot r_{ij} \qquad j, t = 1,n$$

resultam do produto da matriz transporta de [R] pela matriz [R], sendo, por isso, fácil de verificar a simetria do dito determinante.

Falta, porém, analisar se as soluções obtidas das equações anteriores dão um máximo ou um mínimo de U.

Verificar-se-á que, se o determinante principal for diferente de zero, qualquer solução não pode deixar de ser um mínimo.

Com efeito, seja H_1^o, H_2^o, H_3^o ..... H_n^o uma solução.

O conjunto de valores H_1^o, H_2^o, ... $H_1^o + \triangle H$, ... $H_j^o - \triangle H$, ... H_n^o que satisfaz ainda a condição

$$S = \sum_{i=1}^{n} H_i^o$$

dá um valor de U, certamente crescendo com $\triangle H$ a partir de certa altura, e já não satisfaz ao sistema. É pois certo que, neste caso, a solução encontrada dá um mínimo da função U.

Outras condições poderiam ser impostas como, por exemplo, as da questão seguinte:

Determinar a distribuição da carga que, tornando máximo $S = H_1 + H_2 + H_3 + \ldots + H_n$, garante que as tensões, quer no fecho quer na nascença do arco, são sempre positivas ou, no limite, nulas.

É este um problema de programação linear pois tanto a função a maximizar como as condições de restrição são funções lineares.

Não se indica a resolução que nada tem de especial e apresenta-se o problema, apenas, para sugerir mais uma possibilidade do método que parece interessante.

8 — NOTA FINAL

Como nota final referir-se-á a inversão da matriz [B].

É que, ao efectuar os cálculos recorrendo a ordenadores científicos, podem surgir dificuldades em face da limitada capacidade do ordenador. Para as atenuar, vai referir-se um processo de inversão que parece de aconselhar.

Se a matriz [A] for de ordem N, efectuando N vezes as transformações seguintes, obtém-se a matriz inversa $[A]^{-1}$. Assim com $K = 1,N$

1) Transformação da linha de ordem K

$$a'_{kj} = \frac{a_{kj}}{a_{kk}} \qquad (j \neq k)$$

2) Transformação da linha de ordem i

$$a'_{ij} = a_{ij} \quad \frac{a_{kj}\, a_{ik}}{a_{kk}} \; (i, j \neq k)$$

3) Formação da coluna de ordem k

$$a'_{kk} = \frac{1}{a_{kk}}, \quad a'_{ik} = -\frac{a_{ik}}{a_{kk}}$$

9 — AGRADECIMENTO

Tendo-nos sido permitido utilizar o Centro de Cálculo Científico do Instituto Gulbenkian de Ciência, onde foram efectuados cálculos relativos ao presente trabalho, aqui deixamos expresso o nosso agradecimento.

CONSTRUÇÕES TÉCNICAS, LDA.

PRAÇA DO MUNICÍPIO, 13-3.º — LISBOA 2 • TEL. 36 65 06

SONDAGENS • FUNDAÇÕES
TRABALHOS MARÍTIMOS
PONTES E ESTRUTURAS

Companhia Cimento Tejo — Alhandra

Ponte-cais com o comprimento de 140 metros, para acostagem de navios até 2700 t., em Alhandra

Projecto e execução de CONSTRUÇÕES TÉCNICAS, LDA

WABCO

WESTIN'GHOUSE
AIR BRAKE COMPANY
Construction Equipment Division
Peoria (Ilinois) - 61601

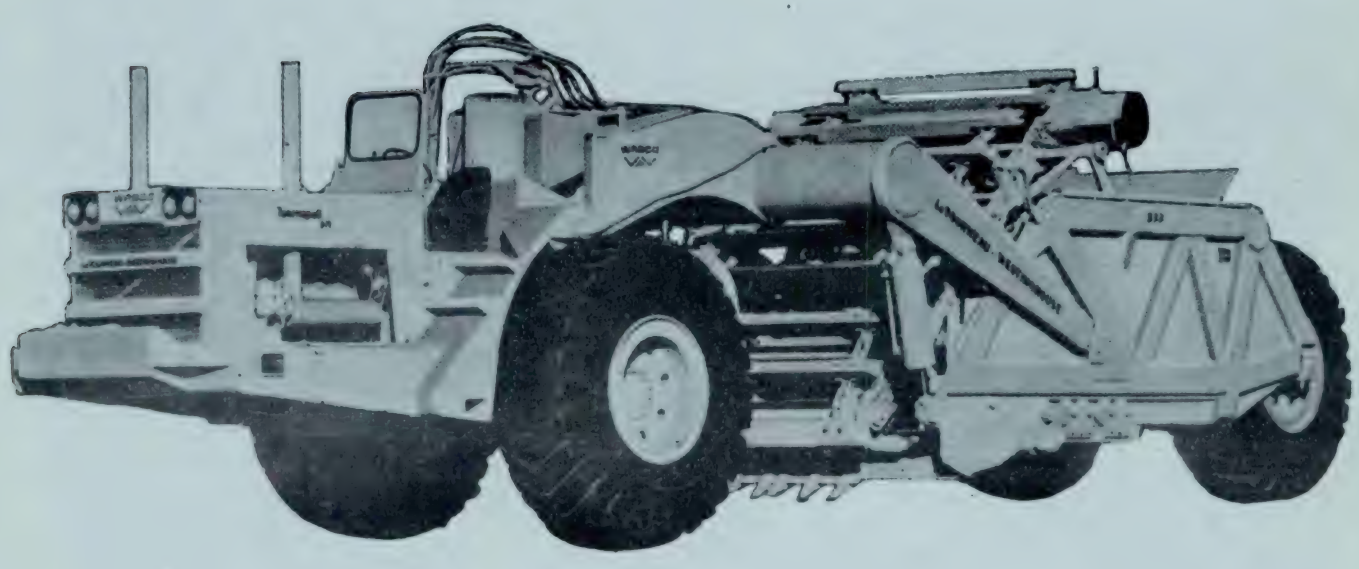
"TOURNAPULL-SCRAPERS"

LE TOURNEAU WESTINGHOUSE

CAPACIDADE DE 11, 21 E 31 JARDAS CÚBICAS

NÃO NECESSITA DE TRACTOR PARA EMPURRE!
UMA SÓ MÁQUINA... UM SÓ OPERADOR...

Escarifica... Carrega... Transporta... Descarrega... Em terrenos de toda a natureza!



DISTRIBUIDOR EXCLUSIVO

GUEDES & ALMEIDA LDA.

Rua Áurea, 181-2.º — LISBOA-2 — TELEFS. 32 50 80 e 32 78 45

Através das suas organizações de: LISBOA • LUANDA LOBITO • NOVA LISBOA e Agências de: PORTO, GUINÉ, S. TOMÉ E PRÍNCIPE e CABO VERDE fornecerá todos os elementos técnicos, para criteriosa escolha, assistência técnica e sobresselentes.
A1-a

VIDA ESCOLAR E ASSOCIATIVA

C. D. U. 519.4 : 54

ALGUMAS APLICAÇÕES DA TEORIA DOS GRUPOS À QUÍMICA (*)

por J. C. GONÇALVES CALADO
Assistente do I.S.T.
Bolseiro da C.E.E N. (I.A.C.)

RESUMO

Após uma breve introdução à Teoria dos Grupos de Simetria, apresentam-se algumas aplicações no domínio da Química. Salienta-se a importância da Simetria no estudo das propriedades moleculares, tratando em especial alguns problemas de hibridação de orbitais e de espectros de vibração (no infra-vermelho e de Raman). Justifica se a necessidade de inclusão destes assuntos nos cursos actuais.

0. INTRODUÇÃO

0.1. Preliminar

A escolha do tema destas conferências justifica-se por três motivos: em primeiro lugar trata-se de aplicações de conceitos aprendidos nas cadeiras de formação básica (matemáticas) à Química Moderna. Parece-nos ser tanto mais de salientar este facto quanto é certo que o presente ciclo de conferências foi organizado pelos alunos do 3.º ano de Química cuja posição no curso se situa precisamente no limiar entre as cadeiras formativas e as de aplicação.

Em segundo lugar procurámos escolher um assunto não demasiado especializado, mas ao mesmo tempo atraente e útil, que interesse a várias disciplinas como é o caso da Química Orgânica, Química Inorgânica e até a Metalurgia e a Cristalografia.

Em terceiro lugar trata-se dum complemento de matéria incluída no nosso curso de Química-Física no Instituto Superior Técnico.

As aplicações que vamos aqui apresentar derivam todas dum conceito fundamental, que é o de simetria.

São já conhecidas da Cristalografia e da Química Orgânica algumas aplicações importantes dos problemas da simetria. Em particular, o estudo da actividade óptica dos compostos pode fazer-se a partir do conhecimento da simetria das respectivas moléculas. Dum modo geral, todas as questões que estejam directamente relacionadas com a estrutura molecular ganham em clareza e simplicidade se forem estudadas a partir das propriedades de simetria das moléculas. Estão neste caso os espectros vibracionais e electrónicos, o momento dipolar eléctrico, a hibridação de orbitais, as teorias das orbitais moleculares e do campo de ligandos, para citar apenas as mais importantes. Como veremos, o conhecimento da simetria molecular traz a todos estes assuntos uma valiosa contribuição, generalizando ideias, simplificando os problemas e permitindo distinguir, «a priori», o possível do impossível.

No entanto a simetria é um conceito universal e a sua importância não se limita ao domínio das ciências físicas. Na vida corrente anda em geral associada a um conceito de beleza ou perfeição, a um sentido de harmonia e ordem que em geral resultam duma regularidade de forma, da existência de um período ou ritmo, etc. A arqui-

(*) — Conferências proferidas no Instituto Superior Técnico a 25, 29 de Março e 1 de Abril de 1966, integradas no «I Ciclo de Conferências de Química» organizado pelos alunos do 3.º ano.

tectura duma catedral românica, a rima de um soneto ou a forma A — B — A do 1.° andamento de uma sonata revelam aspectos diferentes de uma mesma ideia, a de simetria.

A universalidade desta noção tem sido salientada em inúmeras ocasiões. No prefácio que JAMES R. NEWMAN escreveu para a edição das lições sobre simetria de HERMANN WEYL (o grande matemático a quem se devem os primeiros estudos extensivos sobre as aplicações da teoria dos grupos à Física Quântica) afirma-se:

«A simetria estabelece um parentesco, ao mesmo tempo ridículo e maravilhoso, entre objectos, fenómenos e teorias sem relações aparentes entre si: magnetismo terrestre, véus de senhora, luz polarizada, selecção natural, teoria dos grupos, invariantes e transformações, os hábitos de trabalho das abelhas na colmeia, a estrutura do espaço, formas dos vasos, física quântica, escaravelhos, pétalas de flores, figuras de interferência de raios-X, divisão celular no ouriço-do-mar, posições de equilíbrio dos cristais, catedrais românicas, flocos de neve, música, teoria da relatividade».

De facto, não só o homem tem utilizado a simetria, mais ou menos conscientemente, em todas as suas formas de expressão, como a própria natureza está organizada segundo princípios de simetria. «God always geometrizes», diz o provérbio inglês...

A razão de ser destes factos reside, como é evidente, nas ideias matemáticas que estão na base da organização do nosso mundo físico. Como dizia HENRI POINCARÉ, «a matemática é a arte de dar o mesmo nome a coisas diferentes», enquanto o mundo dá nomes diferentes à mesma coisa.... Por um lado, as leis matemáticas que regem a natureza são as responsáveis pelas manifestações da simetria na natureza; por outro lado, a representação intuitiva da ideia matemática no espírito criador do artista origina simetria na arte.

Embora o conceito de simetria não esteja de modo algum restringido aos objectos que ocupam um certo espaço, a nós vai-nos interessar o seu aspecto geométrico, isto é, a simetria definida em relação aos três elementos: ponto, recta e plano. Porém, como o estudo quantitativo (matemático) da simetria se apoia na Teoria dos Grupos, vamos começar por rever algumas noções fundamentais desta teoria, antes de fazermos as aplicações à Química.

0.2 Generalidades sobre a teoria dos grupos

Consideremos um conjunto G não vazio, constituído pelos elementos $a, b, c, d, \ldots$ em em número finito ou infinito.

$$G = \{ a, b, c, d, \ldots \}$$

Diz-se que este conjunto constitui um *grupo*, ou que nele se definiu uma estrutura de grupo, se se verificarem os seguintes quatro axiomas:

(i) Dados dois elementos a e b do conjunto, existe uma operação que lhes faz corresponder um outro elemento c que também pertence ao conjunto

$$a, b \in G \qquad a \,.\, b = c \in G$$

A c dá-se o nome de produto de a por b. Este axioma afirma portanto que o conjunto G é fechado em relação ao produto (lei de composição interna).

(ii) Existe no conjunto um elemento e, chamado *unidade direita* ou elemento neutro direito tal que

$$a \,.\, e = a \qquad e \in G$$

qualquer que seja a pertencente a G.

(iii) Cada elemento tem um *inverso direito* que também pertence ao conjunto, isto é

$$a \,.\, \alpha = e \qquad \alpha \in G$$

α é o inverso direito de a, muitas vezes representado por a^{-1}.

(iv) A operação definida em (i) goza da propriedade associativa

$$a\,b \,.\, c = a \,.\, bc$$

Se for válida a propriedade comutativa

$$a \,.\, b = b \,.\, a$$

o grupo diz-se *comutativo* ou *abeliano*.

Pode demonstrar-se, apenas com o auxílio dos 4 axiomas anteriores que o inverso direito de um elemento é também inverso esquerdo do mesmo elemento

$$a \,.\, \alpha = \alpha \,.\, a = e$$

e que a unidade direita é ainda unidade esquerda, isto é,

$$a \cdot e = e \cdot a = a$$

Por consequência, qualquer elemento dum grupo comuta com o seu inverso e a unidade comuta com todos eles.

Outro teorema importante é o que nos dá o inverso do produto de dois elementos

$$(a \cdot b)^{-1} = b^{-1} \cdot a^{-1}$$

que é o produto dos inversos desses elementos na ordem inversa.

Se o grupo tiver um número finito de elementos diz-se grupo finito e o número respectivo chama-se *ordem* do grupo que se representa por *h*. Um exemplo simples de grupo de ordem 2 é o conjunto constituído por + 1 e — 1, com a multiplicação ordinária.

Um conjunto *g* de elementos *u, v, w, ...* de *G* diz-se um sub-grupo se for um grupo

$$g = \{ u, v, w, \ldots \}$$

Entre os sub-grupos de um grupo estão sempre a unidade e o próprio grupo. A ordem dum sub-grupo é divisor da ordem do grupo (finito).

Dado um conjunto de elementos *a, b, c, ...* todos pertencentes a *G*, chama-se sub-grupo gerado por estes elementos ao mais pequeno sub-grupo que os contém. É evidente que qualquer sub-grupo que contém estes elementos inclui necessàriamente as potências

$$a^{-x}, \ldots, b^{y}, \ldots, c^{z}, \ldots$$

obtidas pelo processo habitual. Em particular, podemos considerar o sub-grupo gerado por um único elemento *a*

$$C = \{ \ldots, a^{-m}, \ldots, e, a, a^{2}, \ldots a^{n}, \ldots \}$$

Pode demonstrar-se que se houver duas potências iguais, o grupo *C* tem um número finito de elementos e chama-se então *grupo cíclico* gerado por *a*.

Suponhamos agora um conjunto qualquer de elementos *a, b, c, ...* e uma operação de comparação dos elementos que podemos representar por $\odot$. Esta operação diz-se uma *relação de equivalência* se gozar das seguintes propriedades

Propriedade reflexiva $a \odot a$

Propriedade simétrica $a \odot b \Rightarrow b \odot a$

Propriedade transitiva $a \odot b \wedge b \odot c \Rightarrow a \odot c$

Nestas condições podemos dividir o conjunto em *classes* de elementos equivalentes de tal modo que todo o elemento do conjunto pertence a uma das classes e não há duas classes com elemento comum (disjuntas).

São relações de equivalência a igualdade, a semelhança, o paralelismo.

Suponhamos que o conjunto era grupo e que associávamos a cada elemento *a* todos os elementos *b* da forma

$$b = x^{-1} a x$$

em que *x* é um elemento qualquer do grupo. Chama-se a *b* a *transformada de semelhança* de *a* por *x* e a *a* e *b* *elementos conjugados*. É fácil de ver que se trata duma relação de equivalência. Em particular, cada elemento é conjugado de si próprio, e se *a* é conjugado de *b*, então *b* é conjugado de *a*. O conjunto de elementos conjugados de um dado elemento forma uma classe do grupo. No caso de grupos finitos o número de classes chama-se *índice* do grupo; o número de elementos de cada classe é um divisor da ordem de grupo, mas o mesmo não acontece, em geral, com o índice do grupo.

I. SIMETRIA MOLECULAR

I.1 — Operações de simetria e elementos de simetria

Uma *operação de simetria* é um movimento efectuado sobre um corpo de tal modo que a configuração final (posição e orientação) seja equivalente à configuração inicial. Duas configurações dizem-se equivalentes quando forem indiscerníveis.

Um *elemento de simetria* é uma entidade geométrica — ponto, recta ou plano — em relação à qual é possível efectuar uma ou mais operações de simetria.

Podemos ainda distinguir dois tipos de simetria:

a simetria pontual, que é a que nos interessa no estudo de moléculas isoladas, e é assim chamada porque todos os elementos de simetria da molécula se interceptam num ponto comum que não é deslocado em nenhuma das operações de simetria; e a *simetria espacial*, de interesse no estudo dos aglomerados moleculares ou iónicos, como os líquidos, os cristais, etc., em que algumas operações de simetria incluem movimentos de translacção.

Os elementos e as operações de simetria são correntemente designados em notação abreviada. Actualmente são utilizadas duas notações: a mais recente é a de HERMANN-MAUGUIN, geralmente usada pelos cristalógrafos, e talvez a melhor porque é igualmente aplicável à descrição da simetria pontual e da simetria espacial; a segunda notação é devida a SCHOENFLIES e é ainda hoje utilizada pela maior parte dos espectroscopistas, que estão em geral interessados nas propriedades das moléculas isoladas, isto é, nos grupos de simetria pontual. É esta a notação que usaremos ao longo do nosso estudo, e que é aliás utilizada no excelente livro de F. A COTTON citado na Bibliografia.

Os elementos da simetria são fundamentalmente quatro: o *centro de simetria*, o *plano de simetria*, o *eixo próprio de rotação* e o *eixo impróprio de rotação* ou de *rotação-reflexão*.

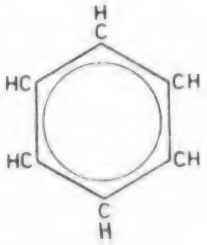
Dada uma molécula qualquer, se for possível associar-lhe um sistema de três eixos coordenados rectangulares, de tal modo que por mudança das coordenadas de cada átomo de

$$[x, y, z] \longrightarrow [-x, -y, -z]$$

se obtenha uma configuração equivalente, à origem das coordenadas dá-se o nome de *centro de simetria* ou *centro de inversão*.

É fácil de reconhecer, por exemplo, que o benzeno tem centro de simetria

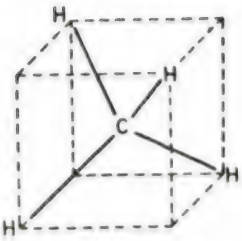
C_6H_6



tem centro de simetria

mas que o metano já o não tem.

CH_4



não tem centro de simetria

Do mesmo modo prontamente se verifica que a forma cadeira do ciclohexano tem centro de simetria, mas o mesmo não acontece com a forma barco.

O centro de simetria e a operação correspondente, chamada inversão, representam-se na notação de SCHOENFLIES por C_i e i e por I (elemento e operação) na notação de HERMANN-MAUGUIN.

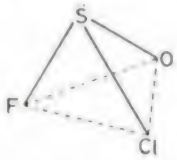
A definição de *plano de simetria* pode fazer-se de modo análogo pela transformação

$$[x, y, z] \longrightarrow [x, y, -z]$$

Se esta for uma operação de simetria, então o plano xy diz-se plano de simetria e a operação (*) correspondente chama-se *reflexão*. O símbolo que os representa na notação de SCHOENFLIES é σ ou C_s e m na notação de HERMANN-MAUGUIN.

Uma molécula que não tem nenhum plano de simetria é FClSO

FClSO



não tem plano de simetria

mas o ião complexo tetracloroplatinato $[PtCl_4]^{-2}$, de estrutura quadrangular plana, tem 5 planos de simetria sendo um o plano da molécula. As moléculas lineares como o CO_2, o N_2O, etc. têm infinitos planos de simetria que formam uma estela.

Ambos estes elementos de simetria — centro e plano — geram apenas duas operações de simetria: a operação habitual e a operação identidade em que a configuração final é idêntica (e não apenas equivalente) à configuração inicial. Assim, se aplicarmos sucessivamente duas reflexões ou duas inversões a uma dada molécula,

(*) Em geral, o elemento de simetria e a operação correspondente são designados pelo mesmo símbolo.

obtemos uma configuração absolutamente idêntica à inicial.

Suponhamos agora o caso dum *eixo próprio de rotação* (*), designado por C_n na notação de SCHOENFLIES e por n na simbologia de HERMANN-MAUGUIN; n representa ainda a *ordem do eixo*. Ao contrário do que sucedia com os dois elementos de simetria anteriores, um eixo de simetria da ordem n gera n operações de simetria que se representam por

$$C_n^1, C_n^2, C_n^3, \ldots C_n^{n-1}, C_n^n$$

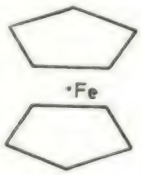
Com efeito, a cada rotação de $\frac{2\pi}{n}$, $2.\frac{2\pi}{n}$, ..., $n.\frac{2\pi}{n}$ rad em torno do eixo correspondem configurações equivalentes à configuração de partida. Como é evidente, a operação C_n^n representa a operação identidade que se designa por E.

Vejamos alguns exemplos:

Para $n = 1$ temos uma rotação de 2π rad, isto é, $C_1 = E$; é o eixo trivial que todas as moléculas apresentam.

A água tem um eixo binário C_2 e o clorofórmio um eixo ternário C_3. O metano tem quatro eixos ternários $4C_3$ e três eixos binários $3C_2$.

O ferroceno, que é o bis (ciclopentadienil) ferro (II) tem um eixo de ordem 5 e o mesmo acontece com o rutenoceno

$(C_5H_5)_2Fe$ 

1 eixo de ordem 5

$(C_5H_5)_2Ru$

1 eixo de ordem 5

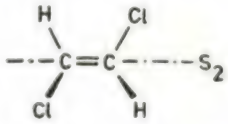
Teòricamente a ordem finita dum eixo próprio de rotação pode ser qualquer; na prática, porém, não se conhecem moléculas com eixos de ordem superior a 8. Mesmo assim, o único exemplo de agrupamento atómico possuindo um eixo de ordem 7 é o ião tropílio $[C_7H_7]^+$; e parece que o único exemplo que apresenta C_8 é o ião $[C_8H_8]^{2-}$, embora a sua estrutura não esteja ainda completamente esclarecida. Deve dizer-se, no entanto, que as ordens mais vulgares são 2, 3, 4, e 6 o que reduz bastante o número de operações de simetria possíveis.

Por generalização, podemos ainda dizer que as moléculas lineares têm um eixo de rotação de ordem infinita.

Finalmente, resta-nos considerar o *eixo impróprio de rotação* ou de *rotação — reflexão* que corresponde ao resultado de duas operações consecutivas: uma rotação própria seguida de reflexão por um plano perpendicular ao eixo de rotação.

Os eixos impróprios de rotação designam-se, na simbologia de SCHOENFLIES por S_n sendo n a *ordem do eixo* (dada por $\frac{2\pi}{\alpha}$ onde α é o ângulo de rotação).

Os 3 eixos binários do metano são eixos impróprios de ordem 4, $3S_4$, como fàcilmente se pode verificar. O *trans*-dicloroetileno tem um eixo impróprio de rotação da ordem 2, que aliás equivale ao centro de inversão.

$C_2H_2Cl_2$ 

Deve notar-se que as duas operações que compõem a rotação imprópria (rotação própria e reflexão) não são, em geral, operações de simetria.

Podem ainda definir-se eixos de inversão que correspondem a uma rotação própria seguida de inversão; são designados na notação de HERMANN-MAUGUIN por n ou $\bar{n}$. Pode mostrar-se que S_n é sempre equivalente a um eixo de rotação-inversão, embora de ordem diferente em geral.

Os elementos de simetria que acabámos de considerar geram as chamadas operações elementares de simetria; nada nos impede, no entanto, de aplicar sucessivamente, a um dado corpo, duas ou mais operações de simetria.

Vamos definir o *produto* de duas operações de simetria como sendo a sua aplicação sucessiva numa certa ordem (preceito de multiplicação). Como caso particular temos a potência de expoente m (inteiro e positivo) de uma operação de

(*) Muitas vezes chamado simplesmente eixo de rotação.

simetria X: é a aplicação de X m vezes consecutivas.

Tem-se por exemplo, como é evidente

$$\sigma^m = \left\{ \begin{array}{lll} E & m \text{ par} & i \\ \sigma & m \text{ ímpar} & E \end{array} \right\} = i^m$$

Da mesma maneira, as n operações de simetria geradas por um eixo próprio de simetria de ordem n são afinal as n primeiras potências da operação de simetria C_n que constituem assim o grupo cíclico gerado por C_n.

Por outro lado S_n gera n operações de simetria sempre que n for par ($n = 2k$) e gera $2n$ operações de simetria quando n é ímpar ($n = 2k + 1$). Suponhamos este último caso; tem-se sucessivamente

$$\begin{array}{ll} & S_n = C_n \cdot \sigma \\ & S_n^2 = C_n^2 \\ & S_n^3 = C_n^3 \cdot \sigma \\ & \cdot \\ & \cdot \\ & \cdot \\ & S_n^{n-1} = C_n^{n-1} \\ n=2k+1 & S_n^n = C_n^n \cdot \sigma^n = \sigma \\ & S_n^{n+1} = C_n^{n+1} = C_n \\ & \cdot \\ & \cdot \\ & \cdot \\ & S_n^{2n-1} = C_n^{2n-1} \cdot \sigma = C_n^{n-1} \sigma \\ & S_n^{2n} = E \end{array}$$

que elucida o que acabámos de afirmar.

Podemos agora enunciar o teorema fundamental da simetria:

«O conjunto completo das operações de simetria geradas pelos elementos de simetria duma dada molécula forma um grupo (no sentido matemático!) se definirmos o produto de operações de simetria como a aplicação sucessiva dessas operações numa certa ordem».

Não vamos fazer a demonstração do teorema, mas sim verificar a obediência aos quatro axiomas em alguns exemplos simples.

Em primeiro lugar é evidente que qualquer molécula admite a identidade E como operação de simetria, que é a unidade ou elemento neutro de todos os grupos de simetria.

σ e i são inversos de si próprios e a operação inversa de C_n^m é C_n^{n-m}, visto que são válidas neste caso as regras formais de potenciação

$$C_n^m \cdot C_n^{n-m} = C_n^n = E$$

Do mesmo modo pode mostrar-se que a operação inversa de S_n^m é

$$\begin{array}{lll} & S_n^{n-m} & n \text{ par} \\ m \text{ par} & C_n^{n-m} & \left. \right\} \; n \text{ ímpar} \\ m \text{ ímpar} & S_n^{2n-m} & \end{array}$$

Outra conclusão importante é que o produto de duas quaisquer operações de simetria é sempre uma operação de simetria (axioma (i)) e este facto pode ser utilizado na previsão da existência de certos elementos de simetria. Por exemplo, a existência de dois eixos próprios de simetria binária C_2' e C_2'' perpendiculares entre si implica a existência dum terceiro eixo binário C_2''' perpendicular ao plano dos dois primeiros, visto que a aplicação sucessiva de C_2' e C_2'' equivale a uma rotação em torno de C_2'''.

Também se a molécula possuir um eixo S_k então possui também C_k e se existir S_{2k+1} existem ainda C_{2k+1} e σ, conforme se pode verificar pela tabuada de S_n.

Por consequência, não é necessário indicar todos os elementos de simetria de uma molécula para ficar bem definido o respectivo tipo de simetria; basta enumerar os elementos suficientes para gerarem todas as operações de simetria possíveis.

I.2. Grupos de simetria pontual

Visto que o conjunto completo das operações de simetria efectuadas sobre uma molécula forma um grupo, é lógico classificar as moléculas em vários conjuntos ou grupos de simetria, de acordo com o número e natureza dos elementos de simetria que possuem. O número de grupos de simetria distintos, teòricamente infinito, é afinal bastante reduzido porque não existem moléculas com eixo de ordem finita superior a 8. É costume considerar apenas 32 grupos de sime-

tria, atendendo a que as ordens 5, 7 e 8 são relativamente pouco prováveis. No entanto, teremos ocasião de indicar mais alguns, dada a existência comprovada de eixos de simetria de ordem 5 e até 7.

Moléculas diferentes pertencendo ao mesmo grupo de simetria pontual terão características análogas, especialmente no que respeita a propriedades dependendo directamente da estrutura molecular. Pode assim prever-se o comportamento duma molécula a partir do conhecimento da sua simetria e inversamente pode determinar-se o grupo de simetria a partir do conhecimento de algumas propriedades da molécula, por exemplo, os espectros de vibração.

Temos então os seguintes grupos de simetria pontual:

GRUPO C_1:

A molécula não possui nenhum elemento de simetria; a única operação da simetria possível é a identidade E (grupo unidade). Exemplo: CH_3CHO.

GRUPO C_i:

A molécula possui apenas um centro de simetria (equivalente a um eixo impróprio S_2); o grupo de simetria tem apenas dois elementos: i e $i^2 = E$.

Exemplo: CHFClCHFCl na configuração «instantânea».

GRUPO C_s:

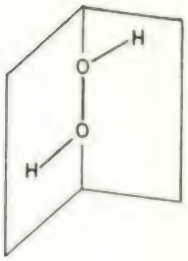
O único elemento de simetria é o plano; as duas operações de simetria possíveis são σ e $\sigma^2 = E$.

Exemplos: ODH e ClOH.

GRUPOS C_n:

Pertencem a estes grupos todas as moléculas que apenas possuem um eixo próprio de simetria de ordem $n > 1$. Os valores mais correntes são $n = 2,3,4$ e 6.

O exemplo mais comum é o do peróxido de hidrogénio na conhecida estrutura de ROBERTSON.



O eixo de simetria C_2 é a recta ortogonal à aresta do diedro e à linha que une os dois átomos de Hidrogénio, passando pelo ponto médio desta última.

GRUPOS S_n:

Existe um eixo de simetria de ordem n par. A ordem $n = 2$ é trivial visto que corresponde ao grupo C_i; restam portanto os grupos autónomos S_6 e S_4. São raras e de estrutura complexa as moléculas que pertencem a estes grupos.

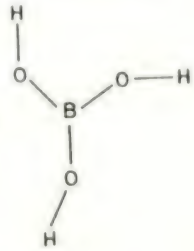
GRUPOS C_{nh}:

As moléculas pertencentes a estes grupos caracterizam-se por ter um eixo próprio de simetria de ordem n e um plano de simetria perpendicular ao eixo; quando n é par existe também centro de inversão. Por convenção considera-se o eixo como vertical, sendo por consequência o plano de simetria horizontal; daí o índice h na notação do grupo. Como habitualmente as ordens mais vulgares são $n = 2, 3, 4$, e 6, havendo portanto quatro grupos de simetria do tipo C_{nh}, a saber: C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}, C_{6h}.

Exemplos:

C_{2h} *trans* — 1,2 — dicloroetileno

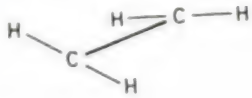
C_{3h} ácido bórico



GRUPOS D_n:

Os elementos de simetria característicos destes grupos são um eixo próprio de simetria de ordem n (eixo principal) e n eixos binários perpendiculares a C_n. São também chamados grupos

diedros (daí o significado da notação). São bastante raras as moléculas que pertencem a estes grupos de simetria; um exemplo óbvio é o seguinte



GRUPOS C_{nv}:

A molécula possui um eixo próprio de simetria de ordem n (vertical) e n planos verticais de simetria passando pelo eixo. Os valores correntes de n são, como sempre, $n = 2, 3, 4$ e 6. São muito vulgares os exemplos de moléculas incluídas nestes grupos. Por exemplo, a água H_2O pertence ao grupo C_{2v}, cujos elementos de simetria são E, C_2, σ_v e σ'_v (ordem do grupo $h = 4$). Este caso é particularmente fácil e elucidativo e merece que nos debrucemos mais sobre ele. Para isso, construamos a chamada tábua do grupo, ou seja, a tabuada de multiplicação das operações de simetria do grupo

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ'_v
E	E	C_2	σ_v	σ'_v
C_2	C_2	E	σ'_v	σ_v
σ_v	σ_v	σ'_v	E	C_2
σ'_v	σ'_v	σ	C_{2v}	E

Verifica-se imediatamente que se trata dum grupo comutativo ou abeliano. De facto, pode demonstrar-se que se uma molécula não tiver um eixo de simetria de ordem superior a 2, o respectivo grupo de simetria é necessàriamente abeliano (*).

Pelo contrário, o grupo C_{3v}, a que pertence o amoníaco NH_3, não é comutativo (possui um eixo ternário). Com efeito, a respectiva tábua de grupo é agora

C_{3v}	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ'_v	σ''_v
E	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ'_v	σ''_v
C_3	C_3	C_3^2	E	σ''_v	σ_v	σ'_v
C_3^2	C_3^2	E	C_3	σ'_v	σ''_v	σ_v
σ_v	σ'_v	σ''_v	σ'_v	E	C_3	C_3^2
σ'_v	σ'_v	σ''_v	σ_v	C_3^2	E	C_3
σ''_v	σ''_v	σ_v	σ'_v	C_3	C_3^2	E

(A)

(B)

(*) Note-se que o teorema contrário não é verdadeiro; os grupos cíclicos C_n são todos comutativos.

Os produtos tabelados são efectivamente BA, isto é, supõe-se aplicada em primeiro lugar a operação A e depois a operação B. Tem-se, por exemplo,

$$C_2 . \sigma_v = \sigma''_v \qquad \sigma_v . C_3 = \sigma'_v \neq \sigma''_v$$

Ao grupo C_{4v} pertence o complexo pentafenilantimónio $Sb(C_6H_5)_5$ cuja estrutura é uma pirâmide quadrangular (considerando os grupos fenilo como esféricos).

GRUPOS D_{nh}:

Existem um eixo próprio de simetria de ordem n (vertical), n eixos binários perpendiculares e um plano horizontal de simetria. Este conjunto de elementos implica a existência de n planos verticais de simetria e até dum centro de inversão sempre que n for par. Os grupos D_{nh} são às vezes representados, nomeadamente em livros alemães, por V_h (de «vierergruppe»). Temos os seguintes exemplos correntes:

D_{2h}	etileno
D_{3h}	tricloreto de boro
D_{4h}	tetracloroplatinato
D_{6h}	benzeno

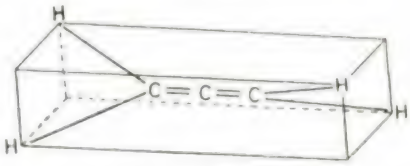
Conhecem-se hoje exemplos de moléculas possuindo eixos de simetria de ordem 5, 7 e talvez 8. Por exemplo, o rutenoceno (bisciclopentadienilruténio) tem um eixo quinário e pertence portanto ao grupo D_{5h}.

Como fàcilmente se reconhece os grupos C_{nv} são sub-grupos dos grupos D_{nh}.

GRUPOS D_{nd}:

São elementos de simetria característicos destes grupos: 1 eixo próprio de rotação de ordem n, n eixos binários perpendiculares e n planos diagonais (daí o índice d na notação do grupo) que bissectam os ângulos entre dois eixos binários consecutivos. Existe ainda S_{2n} e centro de inversão se n for ímpar. Os exemplos correntes caiem dentro dos grupos D_{2d} e D_{3d}:

D_{2d} aleno



EQUIPAMENTO TELEFÓNICO

TELEFONBAU UND NORMALZEIT GMBH

A TELEFONBAU NORMALZEIT
FABRICA:
EQUIPAMENTO DE COMUTAÇÃO PARA REDES PÚBLICAS E PARTICULARES (CENTRAIS, PPC E PPCA)
CENTRAIS PRIVATIVAS AUTOMÁTICAS
TELEFONES DE MESA, PAREDE, ESTANQUES E ANTIDEFLAGRANTES
CENTRAIS TELEX

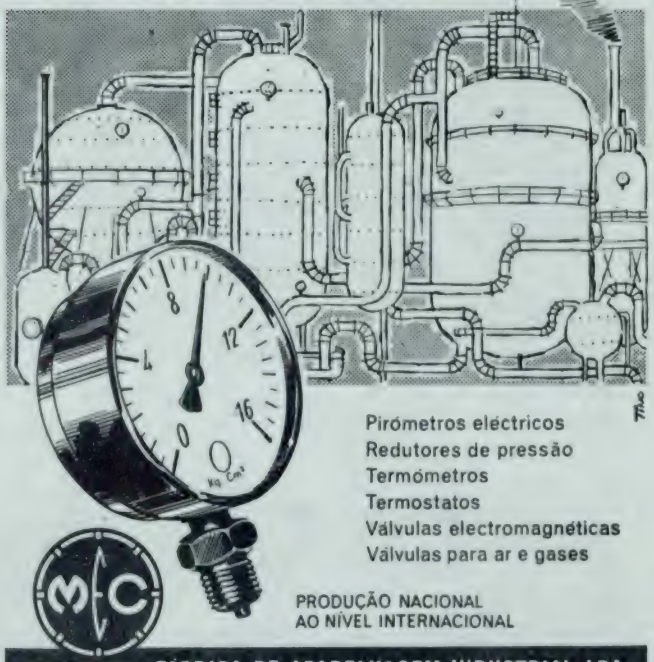
ELECTROTÉCNICOS REUNIDOS Lda.

Av. duque d'avila, 66-3.º telef. 41161/5 LISBOA

ao serviço da energia

TUDOR

manómetros
vacuómetros
manovacuómetros



Pirómetros eléctricos
Redutores de pressão
Termómetros
Termostatos
Válvulas electromagnéticas
Válvulas para ar e gases

PRODUÇÃO NACIONAL
AO NÍVEL INTERNACIONAL

MEC - FÁBRICA DE APARELHAGEM INDUSTRIAL, LDA.
SANTA IRIA DE AZÓIA — TEL. 259 140 /159

850 esc.

CARACTERÍSTICAS: Tubo de aço, articulado em qualquer posição, várias inclinações, fàcilmente transportável, não ocupa espaço quando fechado, prancheta de 1,20 × 0,80 de madeira, em tela. Pintura de estufa.

Em exposição, outros modelos de madeira e metálicos

J. J. SILVA & IRMÃO, LDA.
rua silva carvalho, 232-b-lisboa · telefone 652750 / 680671

Acaba de aparecer

TOPOGRAFIA GERAL

2.º Volume

Pelo Eng.º A. C. XEREZ

Nova edição revista e actualizada

Preço 150$00

Desconto: 10% aos assinantes

Pedidos à Técnica

Mas há ainda moléculas pertencendo ao grupo D_{5d}, como o ferroceno.

Restam-nos, finalmente, os chamados grupos especiais de simetria, que se dividem em dois tipos (a) e (b):

(a) *Grupos das moléculas lineares*

GRUPO $C_{\infty v}$:

A molécula é linear, tem portanto um eixo de simetria de ordem infinita (eixo molecular) e infinitos planos de simetria, mas não tem plano de simetria perpendicular ao eixo (ou centro de inversão). Como exemplos temos todas as moléculas diatómicas heteronucleares e algumas moléculas poliatómicas lineares (cloreto de hidrogénio, sulfureto de carbonilo, óxido nitroso).

GRUPO $D_{\infty h}$:

A molécula é linear mas tem plano de simetria perpendicular ao eixo. Exemplos: o azoto e o anidrido carbónico.

(b) *grupos de simetria cúbica:* caracterizam-se pelo grande número de elementos de simetria.

GRUPO T_d:

É o grupo de tetraedo regular, com 24 operações de simetria. Um exemplo corrente é o tetracloreto de carbono.

GRUPO O_h:

É o grupo do octaedro regular, que admite 48 operações de simetria.

Exemplos: hexafluoreto de enxofre e alguns complexos octaédricos.

GRUPO I_h:

É o grupo do dodecaedro regular e do icosaedro regular e caracteriza-se por ter 120 operações de simetria distintas. Poucas substâncias conhecidas pertencem a este grupo; podemos, no entanto, citar as unidades B_{12} do boro elementar e o ião $B_{12}H_{12}^{2-}$.

É fácil agora, atendendo às características dos vários grupos de simetria pontual, deduzir um processo sistemático de classificação da simetria das moléculas. Indica-se no Quadro 1 uma maneira simples de o fazer.

1.3 — Classes de simetria

Vimos em 0.2 que a transformada de semelhança

$$b = x^{-1}\, a\, x$$

permite dividir o grupo em classes disjuntas de elementos conjugados. Em particular, se se tratar dum grupo de operações de simetria, as classes tomam o nome de classes de simetria.

Para procurar as operações de simetria conjugadas duma certa operação de simetria A, basta calcular todos os produtos $X^{-1}AX$ em que X percorre todas as operações do grupo de simetria. Se este for abeliano, então cada elemento constitui por si só, uma classe e há tantas classes quantas as operações de simetria do grupo; por outras palavras, o índice do grupo é igual à ordem do grupo. É o que acontece, por exemplo, com o grupo de simetria C_{2v} em que as classes são 4: E, C_2, σ_v e σ'_v.

Existe, aliás, um elemento que forma uma classe própria em todos os grupos, quer sejam ou não abelianos: é a operação identidade que comuta com todas as outras operações de simetria

$$B = X^{-1}\, E\, X = X^{-1}\, X = E$$

É fácil verificar, por exemplo, que no grupo C_{3v} as três reflexões por um lado, e as rotações C_3 e C_3^2 por outro, pertencem à mesma classe

C_{3v}	elemento	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ'_v	σ''_v
	classe	E	C_3, C_3^2		σ_v, σ'_v, σ''_v		

Note-se que o número de elementos de cada classe é um divisor da ordem do grupo.

Existe uma importante relação geométrica entre elementos duma mesma classe de simetria e que é a seguinte:

«Duas operações de simetria pertencem a uma mesma classe se for possível substituir uma pela outra num novo sistema de coordenadas que seja acessível por uma operação de simetria».

Por outras palavras: a divisão de um grupo em classes, representa uma classificação natural dos elementos do grupo em conjuntos de operações geomètricamente semelhantes.

QUADRO 1

Classificação sistemática da simetria molecular

GRUPOS: $C_{\infty v}$; $D_{\infty h}$; T_d; O_h; I_h; C_s; C_i; C_1; S_n; D_{nh}; D_{nd}; D_n; C_{nh}; C_{nv}; C_n

- MOLÉCULAS LINEARES
  - i
    - não: $C_{\infty v}$
    - sim: $D_{\infty h}$
- SIMETRIA CÚBICA
  - Tetraedro: T_d
  - Octaedro: O_h
  - Dodecaedro, Isosaedro: I_h
- EIXO PRÓPRIO C_n
  - não
    - σ
      - não
        - i
          - não: C_1
          - sim: C_i
      - sim: C_s
  - sim
    - S_{2n} (com ou sem i)
      - sim
        - outros elementos além de i
          - não: S_{2n}
          - sim
      - não
    - $n\ C_2 \perp C_n$
      - não
        - σ_h
          - não
            - $n\ \sigma_v$
              - não: C_n
              - sim: C_{nv}
          - sim: C_{nh}
      - sim
        - σ_h
          - sim: D_{nh}
          - não
            - $n\ \sigma_d$
              - não: D_n
              - sim: D_{nd}

Por exemplo, no grupo C_{3v} as operações C_3 e C_3^2 pertencem à mesma classe porque são equivalentes em sistemas de eixos coordenados relacionados por uma reflexão (que é operação de simetria do grupo) (*).

Dum modo geral, se o grupo não for comutativo as operações C_n^m e C_n^{n-m} pertencem à mesma classe. Por exemplo, no grupo de simetria D_{6h}, as rotações próprias geradas C_6 por estão agrupadas nas seguintes classes:

$$\begin{cases} \text{CLASSE em } C_6: & C_6\,,\ C_6^5 \\ \text{CLASSE em } C_3: & C_6^2 = C_3\,,\ C_6^4 = C_3^2 \\ \text{CLASSE em } C_2: & C_6^3 = C_2 \end{cases}$$

O agrupamento das operações de simetria em classes sugere uma notação abreviada para a representação dos elementos do grupo de simetria. Vimos já que no grupo C_{3v} as operações C_3 e C_3^2 pertencentes à mesma classe correspondem a rotação de $\frac{2\pi}{3}$ rad efectuadas em sentido inverso uma da outra. Podemos portanto representar ambas por C_3 e o conjunto das duas por $2C_3$. Da mesma maneira, no grupo D_{6h} as operações de simetria geradas por C_6 são representadas por

$$\begin{array}{ll} \text{CLASSE em } C_6: & 2C_6 \\ \text{CLASSE em } C_3: & 2C_3 \\ \text{CLASSE em } C_2: & C_2 \end{array}$$

I.4 — Representação matricial dos grupos de simetria

Põe-se agora o problema de saber como vamos utilizar quantitativamente estes conhecimentos, pois até aqui limitámo-nos a um estudo qualitativo: a classificação sistemática dos tipos de simetria das moléculas.

O estudo quantitativo requer, como é óbvio, que se associe a cada operação de simetria, elemento do grupo de simetria, uma ou mais entidades matemáticas capazes de traduzir também as relações existentes entre as operações de simetria do grupo. Por outras palavras, trata-se de arranjar um conjunto de entes matemáticos que seja isomorfo do grupo de simetria em questão. Há diversas maneiras de representar os grupos de simetria, mas a mais simples é talvez a *representação* matricial, que associa matrizes quadradas às várias operações de simetria.

Podemos, por exemplo, representar todas as operações de simetria dum grupo pela matriz unidade de ordem n, que são satisfeitas as regras de multiplicação exigidas pela tabuada do grupo (o produto de matrizes unidade é sempre a matriz unidade ?). Todavia esta representação é trivial visto que se adapta a qualquer grupo de simetria: é a representação unitária

O número de representações matriciais de um grupo pontual de simetria é, evidentemente, infinito; não só podemos escolher matrizes duma ordem qualquer, como podemos construir, dentro dum determinado espaço, vários conjuntos de matrizes susceptíveis de representar o grupo. No entanto, assim como num espaço a um número finito de dimensões há um número infinito de vectores distintos, mas apenas um número finito de vectores unitários ortogonais, também agora temos uma infinidade de representações matriciais mas apenas um número *finito* de representações chamadas irredutíveis. É destas que nos vamos ocupar agora.

Consideremos então um conjunto de matrizes $A, B, C, \ldots$ que forma uma representação dum dado grupo de simetria; então as matrizes $A', B', C', \ldots$ obtidas das primeiras por transformação de semelhança através da matriz X também formam uma representação do grupo. Com efeito, por definição de transformada de semelhança.

$$\begin{aligned} A' &= X^{-1}\,A\,X \\ B' &= X^{-1}\,B\,X \\ C' &= X^{-1}\,C\,X \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned}$$

e o produto $A'\,B'$ será portanto

$$A'\,B' = X^{-1}\,A\,X\,.\,X^{-1}\,B\,X = X^{-1}\,A\,B\,X$$

Se C for o produto de A por B, então é

$$C' = A'\,B'$$

verificando-se assim a regra da multiplicação: ao produto das operações de simetria corresponde o produto das matrizes (isomorfismo).

(*) Para uma justificação mais detalhada, ver Ref. (6), pág. 238 e segs

Por este processo de transformação é possível reduzir a representação matricial inicial a um conjunto de matrizes com elementos não nulos em blocos quadrados ao longo da diagonal, por exemplo,

$$A' = X^{-1} A X = \begin{bmatrix} A'_1 & & & \\ & A'_2 & & \\ & & A'_3 & \\ & & & A'_4 \end{bmatrix}$$

e o mesmo para as outras matrizes B', C', ... da representação.

É fácil mostrar, pela regra do produto das matrizes, que cada conjunto de submatrizes $\{A'_1, B'_1, C'_1, \ldots\}$, $\{A'_2, B'_2, C'_2, \ldots\}$ constitui ainda uma representação do grupo. O processo pode repetir-se até chegarmos a um conjunto de matrizes A'_n, B'_n, C'_n, ... que já não pode sofrer qualquer redução deste tipo; diz-se então que $\{A'_n, B'_n, C'_n, \ldots\}$ constitui uma *representação irredutível* do grupo de simetria, por oposição com as outras representações mais complexas, chamadas *representações redutíveis*.

Simbòlicamente a representação Γ $\{A', B', C', \ldots\}$ pode ser representada da seguinte maneira

$$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4$$

podendo algumas destas representações aparecer mais de uma vez no processo de decomposição.

A determinação das representações irredutíveis dum grupo de simetria é um problema relativamente simples, embora fastidioso no caso de grupos de simetria elevada; no entanto, para a maior parte das aplicações basta-nos conhecer o carácter ou *traço* (*) das matrizes das representações irredutíveis, para o que se atende a 5 teoremas importantes.

Vamos representar, como é hábito, a ordem do grupo por h, o índice do grupo por i, a ordem das matrizes duma representação irredutível por l_k e o traço da matriz correspondente à operação de simetria R na representação k por $\chi_k(R)$.

Teorema 1: O número de representações irredutíveis de um grupo é igual ao número de classes do grupo i.

Teorema 2: A soma dos quadrados das ordens das representações irredutíveis é igual à ordem do grupo h.

$$\sum_{k=1}^{i} l_k^2 = h$$

Teorema 3: Em qualquer representação irredutível a soma dos quadrados dos traços é igual à ordem do grupo h,

$$\sum_R [\chi_k(R)]^2 = h$$

Teorema 4: Em qualquer representação os traços das matrizes correspondentes a elementos da mesma classe são iguais.

Teorema 5: Os traços das matrizes duma representação irredutível podem ser considerados como componentes de um vector num espaço h-dimensional; nestas condições, os vectores associados a diferentes representações irredutíveis são ortogonais, isto é

$$\sum_R \chi_m(R) \cdot \chi_n(R) = h\,\delta_{mn}$$

Para não sobrecarregar a exposição, dispensamo-nos de fazer a demonstração destes teoremas que aliás se pode ver na referência (2) da bibliografia. Vamos no entanto esclarecê-los com alguns exemplos simples.

Em primeiro lugar consideremos o grupo C_{2v} a que pertence a molécula da água. Vimos já em I.3. que este grupo de 4 elementos tem também 4 classes. O número de representações irredutíveis é portanto quatro. Aplicando o Teorema 2 temos

$$l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 + l_4^2 = 4$$

cuja solução só pode ser

$$l_1 = l_2 = l_3 = l_4 = 1$$

Isto significa que as quatro representações irredutíveis do grupo C_{2v} são todas constituídas por matrizes de ordem um (um único elemento) e é

(*) Recorde-se que se chama traço ou carácter duma matriz à soma dos elementos da sua diagonal principal.

fácil de ver, aplicando o teorema 3, que esse elemento (traço) só pode ser ± 1. No quadro seguinte, chamado tabela dos caracteres do grupo de simetria, indicam-se estas quatro representações irredutíveis

TABELA 1

C_v	E	C_2	σ_v	σ'_v		
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, y^2
A_2	1	1	−1	−1	R_z	xy
B_1	1	−1	1	−1	x, R_y	xz
B_2	1	−1	−1	−1	y, R_x	yz

mero de operações de simetria seja 6, o número de classes distintas é apenas 3, que se representam por E, $2\,C_3$ e $3\,\sigma_v$. Nestas condições, o número de representações irredutíveis é também 3, e a ordem das respectivas matrizes determina-se aplicando o Teorema 2,

$$l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 = 6$$

cuja solução dá

$$l_1 = l_2 = 1 \quad l_3 = 2$$

isto é, duas representações de 1.ª ordem e outra de 2.ª ordem.

TABELA 2

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$		
A_1	1	1	1	z	$x^2 + y^2$, z^2
A_2	1	1	−1	R_z	
E	2	−1	0	(x,y) (Rx , Ry)	$(x^2 - y^2$, xy) (xz,yz)

A parte principal da tabela contém os caracteres das representações; na primeira linha, a seguir à notação do grupo, figuram as operações de simetria agrupadas em classes; a primeira coluna inclui a notação das representações irredutíveis, que adiante explicaremos; finalmente, as duas últimas colunas referem-se a certas propriedades de transformação das coordenadas e das rotações em torno dos 3 eixos ou de funções de grau 2 das coordenadas, que trataremos na devida altura (vd. I.5).

A determinação dos traços das matrizes das representações, que neste caso é intuitiva, faz-se aplicando os Teoremas 3 e 5; como sempre, uma das representações é unitária, a representação A_1.

Vejamos agora o caso do grupo de simetria C_{3v} a que pertence o amoníaco NH_3. Embora o número de operações de simetria seja 6, o número de classes distintas é apenas 3, que se representam por E, $2\,C_3$ e $3\,\sigma_v$. Nestas condições, o número de representações irredutíveis é também 3, e a ordem das respectivas matrizes determina-se aplicando o Teorema 2,

A tabela de carácter do grupo apresenta-se em anexo (Tabela 2).

Os traços das duas primeiras representações são óbvios, e os da terceira, representação de segunda ordem E, podem ser fàcilmente determinados invocando o Teorema 5,

$$\sum_R \chi_1 (R)\, \chi_3 (R) = 0$$

$$\sum_R \chi_2 (R)\, \chi_3 (R) = 0$$

Por outro lado sabemos que o traço da matriz correspondente à operação identidade (matriz unidade) é 2 e que a soma dos quadrados dos traços é igual a 6. Estas relações permitem-nos

TABELA 3

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$		
A'_1	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2$, z^2
A'_2	1	1	−1	1	1	−1	R_z	
E'	2	−1	0	2	−1	0	(x,y)	$(x^2 - y^2$, xy)
A''_1	1	1	1	−1	−1	−1		
A''_2	1	1	−1	−1	−1	1	z	
E''	2	−1	0	−2	1	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)

determinar com a maior facilidade os caracteres que se pretendem.

Consideremos ainda a caso de moléculas com a mesma estequiometria AB_3, mas planas e pertencendo ao grupo de simetria D_{3h}; é o caso, por exemplo, do ião carbonato CO_3^{2-}. É fácil mostrar, por raciocínios análogos, que os traços das várias representações são os que se indicam na Tabela 3.

Finalmente consideremos o caso das moléculas tetraédricas, grupo T_d com 5 classes em que aparecem representações de 3.ª ordem.

Deve notar-se que alguns grupos de simetria têm representações cujos traços são números imaginários; estão neste caso, por exemplo, os grupos C_n e C_{nh} ($n > 2$).

Outro caso especial é o das moléculas lineares que pertencem aos chamados *grupos contínuos*, com um número infinito de operações de simetria. O número de representações irredutíveis destes grupos é também infinito; todavia em geral é possível ordenar estas representações, servindo-nos, nos problemas práticos, apenas dos primeiros termos. Assim, por exemplo, para o grupo $C_{\infty v}$ a respectiva tabela costuma apresentar-se com o aspecto que se indica algures na (Tabela 5).

A simbologia hoje quase universalmente utilizada para representações irredutíveis é devida a MULLIKEN (1933), embora alguns outros continuem a usar a notação de BETHE (1929), mais antiga e mais imperfeita. Segundo MULLIKEN, reservam-se as letras A ou B para designar representações irredutíveis de ordem 1 (uni-dimensionais), a letra E para as representações de ordem 2 e as letras T ou F, indiferentemente, para as representações tri-dimensionais (em geral utiliza-se T nos problemas de espectros electrónicos e F nos de vibrações). Nos grupos de moléculas lineares costuma utilizar-se uma simbologia diferente (letras gregas maiúsculas) que deriva das notações espectroscópicas deste tipo de moléculas.

Dentro das representações irredutíveis de ordem 1, reserva-se a letra A para aquelas que são simétricas com respeito à rotação de $2\pi/n$ rad em torno do eixo principal C_n, melhor dizendo,

TABELA 4

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2+z^2$
A_2	1	1	1	−1	−1		
E	2	−1	2	0	0		$(2z^2-x^2-y^2,\ x^2-y^2)$
T_1	3	0	−1	1	−1	(R_x, R_y, R_z)	
T_2	3	0	−1	−1	1	(x, y, z)	(xy, xz, yz)

TABELA 5

$C_{\infty v}$	E	$2C_\infty(\phi)$	...	$\infty\sigma_v$		
$A_1 \equiv \Sigma^+$	1	1	...	1	z	$x^2+y^2,\ z^2$
$A_2 \equiv \Sigma^-$	1	1	...	−1	R_z	
$E_1 \equiv \Pi$	2	$2\cos\phi$	...	0	(x, y); (R_x, R_y)	(xz, yz)
$E_2 \equiv \Delta$	2	$2\cos 2\phi$	...	0		(x^2-y^2, xy)
$E_3 \equiv \Phi$	2	$2\cos 3\phi$	...	0		
...	...	...	...	...		

aquelas em que se tem $\chi(C_n) = +1$; anàlogamente B designa uma representação de 1.ª ordem com $\chi(C_n) = -1$ (anti-simétrica).

Utilizam-se ainda nas representações A, B os índices 1 e 2 para designar simetria ou anti-simetria em relação a um eixo binário C_2 perpendicular a C_n ($\chi(C_2) = \pm 1$)) ou, no caso de C_2 não existir, em relação a σ_v. De modo análogo, uma plica, ou duas plicas, significam, respectivamente, simetria e anti-simetria em relação a um plano horizontal, assim como os índices *g* e *u* se referem à inversão, na notação alemã habitual (gerade ≡ par). Torna-se agora evidente a simbologia utilizada nos exemplos anteriores, de acordo com as propriedades das representações matriciais das várias operações de simetria.

I.5 — Bases duma representação

Como as representações irredutíveis dos grupos de simetria nunca vão além da 3.ª ordem, podemos tomar o habitual espaço tridimensional e escolher um sistema de 3 coordenadas cartesianas ortogonais x, y e z. Estas coordenadas podem ser encaradas como as componentes dum vector (x, y, z) que se transforma de acordo com as várias operações de simetria através de matrizes convenientes. Ora é fácil reconhecer que estas matrizes de transformação coincidem, em certos casos, com as matrizes duma representação irredutível dum grupo de simetria. Diz-se então que as coordenadas x, y, z formam uma *base* de representação do grupo.

Por exemplo, o vector (x, y, z) muda em (−x, −y, z) aplicando uma rotação de π rad em torno do eixo dos zz, e a respectiva matriz de transformação é

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

em que os elementos não nulos se reduzem à diagonal principal, visto que as componentes do vector final apenas dependem das componentes do mesmo nome do vector inicial. Isto significa que podemos desdobrar esta transformação global em 3 transformações parciais respeitantes a cada uma das cordenadas x, y e z, com matrizes de 1.ª ordem que coincidem com as representações B_1 B_2 e A_1 do grupo C_{2v} (Vd. penúltima coluna da respectiva tabela). Em outros casos, porém, não é possível separar as coordenadas — no sentido que acabámos de considerar — obtendo-se pares (x,y), (x,z) e (y,z), ou o trio (x,x,z) como base de representações irredutíveis. Por exemplo, o par de coordenadas (x,y) transforma-se de acordo com a representação E do grupo C_{3v} (2.ª ordem), e o conjunto das três (x, y, z) de acordo com T_2 no grupo T_d, representação de 3.ª ordem como é lógico.

Estas considerações aplicam-se ainda às rotações em torno dos 3 eixos coordenados, R_x, R_y e R_z e podem mesmo generalizar-se a qualquer tipo de funções f (x, y, z). Em particular, têm especial interesse no estudo das propriedades estruturais das moléculas, as funções inteiras do primeiro e segundo graus, visto que as orbitais atómicas do tipo-*p* se transformam segundo as coordenadas x, y e z e as orbitais do tipo-*d* segundo funções homogéneas de grau 2 das coordenadas. Com efeito, podemos explicitar a expressão analítica das orbitais atómicas da seguinte maneira (*):

$$\psi(s) = f(r) \qquad \psi(3d_{xy}) = 2xy \,.\, g(r)$$
$$\psi(2p_x) = x \,.\, \varphi(r) \qquad \psi(3d_{xz}) = 2xz \,.\, g(r)$$
$$\psi(2p_y) = y \,.\, \varphi(r) \qquad \psi(3d_{yz}) = 2yz \,.\, g(r)$$
$$\psi(2p_z) = z \,.\, \varphi(r) \qquad \psi(3d_{x^2-y^2}) = (x^2-y^2) \,.\, g(r)$$
$$\psi(3d_{z^2}) = \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{3} \,.\, g(r)$$

. . . . . .

Como *r* é um invariante em todas as operações de simetria, conclui-se que as várias orbitais se transformam de acordo com índice que apresentam na notação habitual. É esta, aliás, a razão da notação abreviada da orbital $3d_{z^2}$, visto que na maior parte dos grupos de simetria as funções z^2 e $x^2 + y^2$ constituem bases da mesma representação ($2z^2 - x^2 - y^2$ transforma-se portanto como z^2).

Em estudo mais rigoroso de moléculas em que intervêm os elementos de número atómico 51 (Antimónio) a 70 (Itérbio) e de 83 (Bismuto)

(*) Para mais detalhes ver, por exemplo, Referência (6).

e 102 (Nobélio) já seria necessário considerar as funções inteiras de grau 3, dado o papel significativo então desempenhado pelas orbitais — *f*.

É portanto fácil, consultando as tabelas dos grupos de simetria, saber quais as orbitais atómicas que são bases duma dada representação irredutível. Por exemplo, no grupo D_{3h} as orbitais *s* e d_z^2 pertencem à representação A'_1, a orbital p_z à representação A''_2 e os conjuntos de orbitais (p_x, p_y) e ($d_{x^2-y^2}$, d_{xy}) à representatação E'.

A importância das funções do 1.º e 2.º graus que aparecem nas tabelas dos grupos de simetria prende-se ainda com as propriedades de transformação do vector momento dipolar eléctrico e tensor da polarizabilidade, de grande importância no estudo dos espectros de vibração, como veremos na III parte.

(Continua)

DO MUNDO TÉCNICO

O PROJECTO HENDERSON

PERFURAÇÃO DUM NOVO JAZIGO DE MOLIBDÉNIO

C. D. U. 622.346 : 622.25

Anuncia-se que foi iniciada a perfuração dum novo poço de 7 metros de diâmetro para a exploração dum jazigo de molibdenite recentemente descoberto perto de Empire, no Colorado.

Este poço de 716 metros, permitirá proceder a um exame mais completo das zonas mineralizadas, servindo ainda de poço de exploração. A descoberta do jazigo, foi anunciada pela primeira vez Junho de 1965 e informações complementares foram dadas em Maio de 1966.

Pelas perfurações efectuadas até ao presente podem-se avaliar as reservas como se segue:

provadas — cerca de 154 milhões de toneladas com 0,45 % de MoS_2.

prováveis — cerca de 82 milhões de toneladas com 045 % de MoS_2.

total — cerca de 236 milhões de toneladas com c,45 % de MoS_2.

A estimativa das reservas é baseada em 22 perfurações por meio de diamante. O comprimento total das perfurações é de 24 quilómetros, ocupando 17 das perfurações 4 quilómetros de zonas mineralizadas.

A análise geológica dos resultados já obtidos deixa supor que se poderão confirmar reservas mais importantes. Ainda que as perfurações efectuadas permitam estabelecer que o jazigo seja muito importante, serão necessárias informações complementares antes de proceder ao estabelecimento de planos detalhados da exploração e de estimar os investimentos necessários. Contudo dadas a profundidade da zona mineralizada e o processo de extracção que poderá ser utilizado pode-se supor que estes investimentos serão bastante elevados.

Julga-se que o jazigo entre em produção dentro de 5 ou 6 anos, para o que o poço inicial foi previsto para ser utilizável nos diferentes estados de desenvolvimento e de produção. O estudo preliminar das instalações de exploração é baseado numa extracção diária de 30 mil toneladas de mineral permitindo uma produção anual de 23 mil toneladas de molibdénio metal.

(News about Climax Molybdenum)

A ENERGIA NUCLEAR NO QUOTIDIANO

C. D. U. 621.039

Foi há pouco tempo publicado em Londres, o relatório anual da U. K. A. E. A. — Autoridade de Energia Atómica do Reino Unido, no qual se pode bem ver a variadíssima gama de aplicações que a energia nuclear já tem ou pode ter no dia a dia, desde a produção de electricidade mais barata, à destilação de água salgada, à detecção de explosões nucleares no espaço e aos novos métodos de investigação criminal e de terapêutica.

Pode também ver-se por esse relatório que as decisões tomadas pela U. K. A. E. A. durante o período de 1965/66, por ele abrangido, se vão reflectir inevitàvelmente no curso das actividades daquela organização durante os anos mais próximos. Dessas decisões a mais importante traduziu-se, sem dúvida, na adopção do A. G. R. ou seja, o reactor avançado de arrefecimento por gás para as centrais a construir no âmbito da segunda fase do programa de apetrechamento nuclear da Grã-Bretanha, incluindo a construção de um protótipo de reactor rápido.

Os serviços comerciais deste organismo — venda de elementos combustíveis e radioisótopos — averbaram um lucro de 3,9 milhões de libras. A maior parte das vendas registadas foi de serviços relacionados com o combustível para reactores, que atingiram o volume bruto de 19,5 milhões de libras, conquanto as vendas de isótopos rendam anualmente mais de 2 milhões de libras, provenientes, em mais de 50 % dos casos, de outros países.

Os reactores de Calder Hall funcionam actualmente

com rendimento notável durante os meses de inverno estiveram a trabalhar a 100 % da carga. Mas todas as atenções se voltam actualmente para o A. G. R. e já se prevêm para os modelos aperfeiçoados deste tipo de reactor, combustível de carboneto de urânio que não necessita de invólucros e se apresentam já irradiados. Na central de Winfrith Heath, em Dorset, o reactor da água pesada gerador de vapor (S. G. H. W.) continua em construção dentro do calendário previsto. Este reactor entrará a funcionar a plena potência — 100 Megawatts — em Setembro de 1967. Uma vez enriquecido o combustível, a capacidade de produção da S. G. H. W. de Winfrith Heath, poderá ir mesmo aos 120 Megawatts.

É possível também que o sistema S. G. H. W. possa funcionar com urânio natural, o que lhe abriria grandes perspectivas fora da Grã Bretanha, nomeadamente entre os países que não dispõem de combustível enriquecido.

Prevendo já quaisquer problemas que venham levantar-se no futuro, a U.K.A.E.A., dedica-se a investigações e pesquisas a longo prazo. Assim, possui, em Harwell, um ciclotrão de energia variável, que será utilizado para estudo dos efeitos físicos e químicos das radiações. Estes estudos têm, uma vez realizados, uma multiplicidade de implicações de que bem se poderá fazer ideia se se disser que, por exemplo, se verificou que as alterações cromáticas no iodeto de potássio provocadas pelas irradiações ultra-violetas, poderão levar a um novo método de miniaturização do arquivo de informações para computadores, em micro-cristais.

A Energia Nuclear na Investigação Criminal

O Centro Radioquímico de Amersham, possui actualmente mais de 80 «produtos rádio-farmacêuticos» diferentes, para utilização clínica. Contam-se entre eles, um composto para a localização de tumores cerebrais, e um reagente especial para tratamento radiológico do sistema linfático, que, como se sabe, é uma das vias de dissimilação do cancro no organismo humano.

Também a indústria poderá potencialmente vir a dispor da poderosa arma que é a análise de activação, por intermédio da qual se tornam radioactivos os materiais e se analisam depois as características das radiações desses elementos. Em Aldermaston, onde existe um laboratório de ciências médico-forenses, tal técnica tem vindo a ser profundamente estudada, para se averiguar a forma como poderá ser utilizada na detecção de crimes.

Para já, ficou provado que a composição do cabelo das pessoas difere tanto umas das outras como as próprias impressões digitais.

Da mesma forma, estão em estudo sistemas automáticos para codificar em números as impressões digitais, armazenando-as depois, na memória de um computador.

(British Industrial and Trade News, nº 21)

NOVA FÁBRICA PARA A PRODUÇÃO DA POLIIMIDA «VESPEL»

C. D. U. 678.745

Vai ser construída nos Estados Unidos, em Newark, Estado de Delaware, uma fábrica onde serão fabricadas em quantidades comerciais peças de precisão «Vespel» assim como abrasivos produzidos com as mesmas resinas poliimídicas.

Os trabalhos começarão em Dezembro de 1966 e prevê-se que a fábrica entre em funcionamento no início de 1968.

Os investigadores escolhem geralmente as poliimidas quando têm de estudar peças que devam conservar as suas propriedades físicas numa gama longa de temperaturas. Na realidade as peças nesta poliimida podem ser utilizadas entre — 240 °C e + 480 °C, apresentando ainda uma boa resistência às radiações.

As peças em poliimida apresentam excelente estabilidade dimensional, boa resistência à abrasão e elevada constante dieléctrica, sendo já utilizadas com muito sucesso em múltiplos sectores. Sob a forma de juntas estanques usam-se na indústria aeronáutica, em elementos para compressores na indústria do frio e em isolamentos para os instrumentos de medida nos poços de petróleo.

A sociedade produtora decidiu não comercializar as resinas poliimídicas como tal, reservando-se vender os produtos acabados perfeitamente adaptados às características fornecidas pelos clientes. Esta decisão, contrária à política geralmente seguida e que consiste em vender as resinas plásticas aos transformadores, foi ditada pelo facto da realização de peças em poliimida levantar problemas de difícil resolução.

As poliimidas foram descobertas há mais de 10 anos num laboratório da estação experimental da Du Pont. Em 1962 foi lançada uma campanha experimental de comercialização das peças de precisão em «Vespel», que teve tal sucesso que foi construída uma fábrica especializada na produção destas peças à escala comercial. Os resultados obtidos demonstraram que diversos sectores industriais tem uma crescente necessidade de tais peças.

Além destas peças de precisão continuar-se-ão a

comercializar abrasivos à base de poliimidas tais como moinhos de diamante, rectificadores e placas de rodagem. Os abrasivos à base desta mesma poliimida são muito utilizados para rectificar e polir as partes em carbureto das máquinas-ferramentas.

A sociedade produtora do «Vespel» fabrica e vende igualmente outros produtos em poliimidas: esmaltes para fios, vernizes, adesivos e aglomerados.

(Du Pont Information Service)

O FILME DE «MYLAR» ONDULADO ESTÁ AGORA DISPONÍVEL NA EUROPA

C. D. U. 678.674 : 621.315 : 61

O filme do poliester «Mylar» ondulado, introduzido na Europa em 1965 numa escala experimental, está agora disponível em quantidades industriais.

Concebido sobretudo para o isolamento de fios e cabos, este novo tipo de filme aprisiona o ar nas suas estrias, oferecendo assim ao núcleo uma barreira térmica superior à dos materiais de isolamento tradicionais em espessuras iguais ou mesmo superiores.

Além disso, os enrolamentos do filme sobrepõem-se parcialmente o que reduz os deslocamentos relativos do núcleo e do seu invólucro e evita que, quando da flexão do cabo, apareçam fendas no isolamento. Este filme apresenta uma forte resistência ao corte, reforçada pelas ondulações que se comportam ainda como agentes anti-choque em relação aos condutores existentes no núcleo central.

O filme deste poliester é fabricado em diversas fábricas dos Estados Unidos. Na Europa, há instalações de fabricação no Luxemburgo, que se dedicam a produzir os tipos do filme «Mylar» mais correntemente utilizados na indústria em geral e no ramo eléctrico em particular, e que alimentam o mercado europeu.

(Du Pont Information Service)

Os invólucros canelados para fios produzidos no filme poliester «Mylar» oferecem a melhor protecção do núcleo dos fios telefonicos, As estrias criam em redor do núcleo nma camada de ar cujo isolamento térmico é superior à de outros isolantes de espessura igual ou superior

ESTUDO DO NÚCLEO DOS ISÓTOPOS DO CÁLCIO

C. D. U. 546.41.02 : 539.14

Um grupo de físicos do Laboratório de Física das Altas Energias de Stanford, acaba de proceder sob a direcção do professor Hofstadter, prémio Nobel da Física em 1961, a interessantes experiências sobre as dimensões dos núcleos do Cálcio 40 e do Cálcio 48.

O núcleo do Ca^{40}, tem 20 protões e 20 neutrões enquanto o do Ca^{48} tem 20 protões e 28 neutrões. Os investigadores bombardearam alvos de Ca^{40} e Ca^{48} com um feixe de electrões de 250 MeV do acelerador linear Mark III. Medindo os ângulos de deflexão dos

electrões e a quantidade de energia pedida quando do choque com o alvo, foi assim possível obter-se uma nítida imagem da estrutura dos núcleos de cálcio bombardeados. A técnica usada baseou-se na resistência que os protões (de carga positiva) oferecem ao feixe de electrões (de carga negativa) enquanto os neutrões (partículas não carregadas) se deixam atravessar por um feixe ao qual não opõem qualquer resistência tangível Utilizando um espectrómetro de 182 cm, os investigadores poderam assim detectar o lugar e dimensões dos protões e observar diferenças de comprimento da ordem de 0,025 fermi, o que corresponde a cerca de três trilionésimos da secção dum cabelo.

Os investigadores poderam então constatar que, contràriamente a todas as previsões, o raio do núcleo de Ca^{48} que contém mais oito neutrões, não aumenta proporcionalmente, sendo o seu comprimento suplementar apenas de 2/3 do que deveria ser.

Por outro lado, a distribuição de protões no interior do núcleo de Ca^{48} é diferente da que se verifica para o Ca^{40}. A carga eléctrica dos protões do Ca^{48}, em particular, é mais forte à superfície do núcleo ainda que este oponha uma «pele» mais nìtidamente delimitada e mais resistente ao feixe de electrões.

Mas este tipo de distribuição da carga do núcleo é geralmente típica dos núcleos mais estáveis, notaram os físicos. E contudo é característica do Ca^{48} que é um isótopo bastante raro. Ora se o Ca^{48} é mais estável que o Ca^{40}, este deveria ser um isótopo muito abundante na natureza, o que não acontece. Os físicos que procederam a experiências do mesmo tipo, ainda que menos concludentes, com o Ca^{44} que não tem senão 4 electrões suplementares, concluiram que era a distribuição dos protões e não o isótopo em si que era mais estável.

O grupo de Stanford vai continuar os seus estudos de constituição da matéria estudando o núcleo do átomo de chumbo de que um dos isótopos tem 46 neutrões suplementares.

(Sciences Techniques, n.º 93)

NOVOS LÍQUIDOS ESTÁVEIS COMPLETAM A GAMA DOS COMPOSTOS FREON

C.D.U.546.261 : 546.16

Uma série de produtos fluorcarbonetados estáveis e inertes utilizáveis em gamas de temperaturas variáveis, acabam de se juntar ao grupo de compostos fluorcarbonetados «Freon», podendo-se desde já prever que estes fluidos terão numerosas aplicações na indústria, cujas necessidades de líquidos estáveis e seguros, com boas propriedades dieléctricas e termodinâmicas e susceptíveis de cumprir a sua função numa vasta gama de temperaturas, são cada vez maiores.

Um destes líquidos, o Freon E 3 é já utilizado a título experimental como dieléctrico e isolante em aparelhos eléctricos e electrónicos, tais como transformadores, componentes electrónicos, módulos funcionais e montagens. Serve também de plastificante, de produto estanque e de fluido hidráulico à temperatura ambiente.

Outros usos estão previstos para este grupo de produtos: a refrigeração por evaporação de materiais eléctrónicos, giroscópios e laseres.

A aparição deste produto foi seguida da de quatro líquidos homólogos. Trata-se de líquidos estáveis cuja composição não se modifica em caso de evaporação parcial sendo usados em vez de outros fluorcarbonetos como refrigerantes, solventes e propulsores de gás para aerosóis; não são inflamáveis nem tóxicos e são compatíveis com a maior parte dos materiais.

As temperaturas de utilização destes produtos situam-se entre — 154,5°C e + 226°C à pressão atmosférica, podendo-se ainda escolher o fluido que satisfaça exactamente as condições requeridas.

Indicam-se em seguida os pontos de ebulição e de fusão destes novos fluorcarbonetos:

	Ponto de fusão	Ponto de ebulição
Freon E 1	— 154,5°C	+39°C
Freon E 2	— 123°C	+ 101°C
Freon E 3	— 107°C	+ 153°C
Freon E 4	— 94,5°C	+ 193°C
Freon E 5	— 84°C	+ 226°C

(Du Pont Information Service)

Resumos dos artigos publicados na Técnica n.º 364

Ano XLII — Janeiro 1967

SALES LUÍS — C. D. U. 536.1

Temperatura, calor e energia interna

Técnica No. 364 — XLII — 1. 1967, pág. 153-158.

Mesmo na literatura mais recente é frequente encontrar-se o conceito de calor confundido com o de temperatura e o de energia interna. Considerando-se que a estruturação científica da termodinâmica só se torna possível desde que não se conceda à grandeza calor outros atributos que lhe são atribuídos e ou impostos pelo primeiro princípio da termodinâmica, faz-se a análise crítica desses conceitos, realçando-se, nomeadamente, a interpretação da célebre experiência de Joule e o significado da determinação do apelidado equivalente mecânico do calor.

LUÍS VICENTE — C. D. U. 621.374.3

Circuitos lógicos de resistências — transistor. Dimensionamento

Técnica No. 364 — XLII — 1. 1967, pág. 159-165.

No presente artigo expõe-se um método fácil de dimensionamento de circuitos lógicos de resistências-transistor. Tomam-se em consideração as tolerâncias dos componentes e das tensões de alimentação. Definem-se e determinam-se os factores de entrada e saída necessários para posteriores projectos de sistemas lógicos

VIRGÍLIO IGREJA — C. D. U. 661.257 — 52

Estudo de um sistema de comando automático para o circuito de secagem e absorção de uma fábrica de ácido sulfúrico

Técnica No. 364 — XLII — 1. 1967, pág. 167-182.

Descreve-se um sistema de comando automático destinado a um processo multidimensional, cuja matriz de transferência é não diagonal. O elemento básico do sistema é uma rede correctora que se determina a partir daquela matriz e cuja associação ao processo conduz a uma matriz de transferência diagonal. É possível, então, formar malhas de regulação sem interacção e utilizar controladores convencionais. Determinam-se, a seguir, os parâmetros destes controladores pelo método de Ziegler Nichols. Finalmente, estuda-se a estabilidade do sistema pelo método do lugar geométrico das raízes (diagramas de Evans).

VALENTE DA SILVA — C. D. U. 627.821.043 [691.32]

Barragem em betão. Estudo da directriz dum arco

Técnica No. 364 — XLII — 1. 1967, pág. 183-190.

Apresenta-se um método de cálculo aproximado, permitindo determinar o estado de tensão em arcos de barragens.
Indicam-se, seguidamente, alguns caminhos com o fim de determinar a solicitação aconselhável, para dado arco, na medida em qne sejam satisfeitas condições, para tanto prèviamente impostas.
Assim, ao ser conhecida a forma dum arco e principalmente a sua directriz, é possível ter uma ideia da carga que esse arco pode suportar, de acordo com a segurança consentida pelas restrições formuladas.

Synopsis of articles published in «Técnica» nº 364

XLII — January 1967

VIRGÍLIO IGREJA UDC 661.257—52

Automatic control of a drying and absorption circuit in a sulphuric acid plant

Técnica No. 364 — XLII — 1. 1967, pp. 167-182.

The non-diagonal transfer matrix of an actual multidimensional process is determined. From this matrix, a network which converts that matrix into a diagonal one is obtained. The virtually independent loops thus determined are then treated by the Ziegler-Nichols's method in order to get the parameters of the P. I. D. single-loop controllers now applicable. At last, the root-locus method is used in the stability analysis of the system.

SALES LUÍS UDC 536.1

Temperature, heat and internal energy

Técnica No. 364 — XLII — 1. 1967, pp. 153-158.

Even in up-to-date literature, the concept of heat is usually mistaken for that of temperature and internal energy. But the scientific framework thermodynamics is only possible when to the heat are not given other properties besides those related with the first principle of thermodynamics. So, a critical analysis of those concepts is undertaken with an emphasis to the interpretation of the famous Joule's experience and the meaning of the determination of the currently called mechanical equivalent of heat.

VALENTE DA SILVA UDC 627.821.043 [691.32]

Concret dams. Study of the directrix of an arch.

Técnica No. 364 — XLII — 1. 1967, pp. 183-190.

An approximate design method allowing the determination of the state of stress in dam arches is presented.
Ways permitting the determination of the advisable load for a given arch, taking into account previously imposed conditions, are then described
Thus, the shape of the arch and mainly its directrix being known, it is possible to have an idea of the load the arch can support, according to the safety allowed by the imposed restritions.

LUÍS VICENTE UDC 621.374.3

Design of logical resistor-transistor circuits

Técnica No. 364 — XLII — 1. 1967, pp. 159-165.

In this paper, a straightforward design procedure of RLT circuits is explained. Resistor, transistor and bias voltage tolerances are taken into account. Fan in and fan out factors are computed.

BIBLIOTECA
FICHEIRO

Classificadores responsáveis:

Duarte Cunha, Silva Casimiro, Tavares Pires

Recortar as indicações bibliográficas que formam uma ficha e estão encimadas por CDU (Classificação Decimal Universal).

Colar cada referência num pequeno rectângulo de cartolina de 75 × 125 mm.

Ordenar pelos índices decimais, *começando da esquerda para a direita,* independentemente do número de algarismos que o índice contiver, e respeitando a seguinte regra de arrumação dos sinais auxiliares:

+ / n.os simples : [ ] = (01/09) (1/9) (=) " "A/Z — .0 .00

Consultar, em casos duvidosos, a exemplificação inserida na «Técnica» n.º 218 e seguintes, ou recorrer à Biblioteca da A. E. I. S. T.

Notar que a inserção das fichas nesta publicação respeita a ordem correcta, no intuito de a esclarecer o mais possível.

A comodidade de possuir no próprio local de trabalho um arquivo ordenado e de fácil consulta sobre assuntos que se sabe onde existem, é uma das evidentes vantagens de um ficheiro classificado segundo a CDU.

Os assuntos de que estas fichas são referência ficam patentes à consulta a partir desta data.

BIBLIOGRAFIA

C. D. U. 658.2.658.542.1/.3

Implantação e Movimentação

por *M. Cardoso dos Santos*
L. Pereira Júnior

Série «Técnicas de Produtividade» do I. N. I. I.

As questões relativas à implantação dos meios de produção e à movimentação de materiais e produtos, se bem que normalmente minimizadas dentro do conjunto das preocupações de organização técnica da empresa industrial, têm efectivamente uma importância considerável no que respeita ao nível de custos de produção. Não são raros os casos, apresentados por diferentes autores, em que só a movimentação representa, pelo menos, metade dos custos totais de fabrico.

Com efeito, o limite mínimo a que será possível baixar os custos de fabricação situar-se-á a um nível bastante elevado, se as máquinas tiverem uma disposição caótica e forem mal alimentadas, ou se os aparelhos de movimentação foram mal escolhidos e conduzirem, em consequência, a um desperdício de tempo e de meios que podem constituir uma proporção relativamente elevada das imobilizações da empresa.

Por outro lado, o facto de não se pensar, com suficiente pormenor, nos problemas de implantação e movimentação (até porque eles aparentam uma falsa simplicidade, em relação à qual a aplicação do bom senso parece ser suficiente), tem sido, frequentemente, a causa de decisões que redundam em encargos desnecessários para as normalmente limitadas disponibilidades financeiras da empresa.

Uma boa implantação e uma boa movimentação constituem, pois, factores importantes na gestão económica de qualquer empresa industrial.

Embora reconhecendo que, na maior parte dos casos, o estudo da implantação e o estudo de movimentação estão intimamente interligados, resolveram os autores tratá-los separadamente, no intuito de ser conseguida uma melhor sistematização e clareza na exposição. Isto porque a preocupação fundamental dos autores é apresentar *métodos de estudo* com uma elasticidade de aplicação suficientemente grande, que lhes permita virem a ser um instrumento de trabalho útil para a solução dos problemas particulares de implantação ou de movimentação que se levantam em qualquer empresa industrial.

É portanto, cremos, um trabalho dirigido principalmente ao industrial português. A fim de o tornar acessível ao maior número de interessados, houve a preocupação de apresentar apenas noções técnicas simples, de utilização amplamente generalizada e cuja correcta apreensão não necessita de conhecimentos especializados.

V. C. S.

C. D. U. 531.7 : 66

Tratado pratico de mediciones industriales

por *D. Choffat*

Editores Técnicos Asociados — Barcelona
1966, 1 vol. encad., 430 págs.

Trata-se de uma obra muito acessível e muito útil a todos os que têm por função projectar ou manter uma instalação industrial.

EMPRESA ELECTRO CERÂMICA

S. A. R. L.

FABRICANTE DE ISOLADORES PARA EQUIPAMENTO DE SUB-ESTAÇÕES TRANSFORMADORES E DE LINHAS DE TRANSPORTE DE ENERGIA EM ALTA TENSÃO

fabrica igualmente

- isoladores de baixa tensão
- pequena aparelhagem eléctrica em baquelite e porcelana
- tubo plástico "Polivolt" para protecção de condutores
- material em refractário especial para aparelhos de aquecimento

DANIEL VIDAS

SEDE L. BARÃO DE QUINTELA, 3-1.º LISBOA
FÁBRICA - CANDAL - VILA NOVA DE GAIA

EC 61-1

Oficina e Laboratórios

do

INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO

As oficinas pedagógicas do Instituto Superior Técnico, de CARPINTARIA DE MOLDES, de INSTRUMENTOS DE PRECISÃO, de ELECTROTÉCNICA, fornecem todo o género de material escolar de demonstração para o ensino técnico. Nos laboratórios de QUÍMICA - ANALÍTICA, FÍSICA INDUSTRIAL E DE MINERALOGIA executam-se análises para o público

Para quaisquer informações, dirigir-se ao secretário da comissão executiva

SONDAGENS RÓDIO, L.DA

LISBOA

RUA DE S. BENTO, 644 - 3.º

Telefones: 68 80 96/7/8 ✦ Telegramas: **SETANSOL**

RODIO

SONDAGENS GEOLÓGICAS
ESTUDOS GEOTÉCNICOS
ESTACAS GUNITA
CAPTAÇÃO DE ÁGUAS
CONGELAÇÃO DO TERRENO
IMPERMEABILIZAÇÃO DE OBRAS HIDRÁULICAS
CONSOLIDAÇÃO DE FUNDAÇÕES
ABAIXAMENTO DO LENÇOL DE ÁGUA

—//—

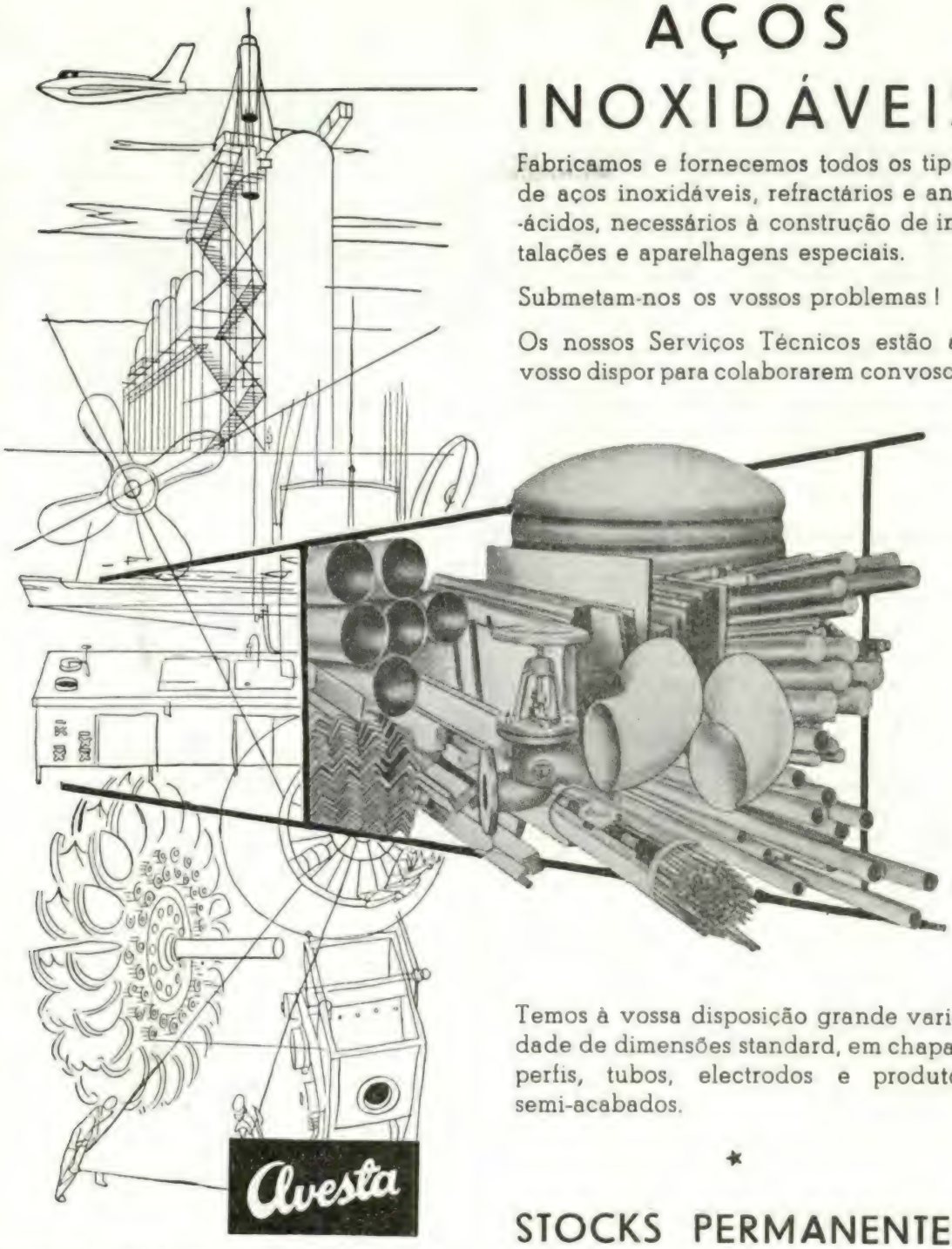
Engenheiro Consultor: **Walter Weyermann**

AÇOS INOXIDÁVEIS

Fabricamos e fornecemos todos os tipos de aços inoxidáveis, refractários e anti-ácidos, necessários à construção de instalações e aparelhagens especiais.

Submetam-nos os vossos problemas!

Os nossos Serviços Técnicos estão ao vosso dispor para colaborarem convosco.



Temos à vossa disposição grande variedade de dimensões standard, em chapas, perfis, tubos, electrodos e produtos semi-acabados.

★

STOCKS PERMANENTES

AVESTA JERNVERKS AKTIEBOLAG
AVESTA — SUÉCIA

Representantes Exclusivos para Portugal e Ultramar:

A. JOHNSON & Co (PORTUGAL), L.DA

SEDE EM LISBOA:
Praça José Fontana, 11-1.º
Telef. 537015-537016-537017-537018

FILIAL NO PORTO:
R. Dr. António Granjo, 160/168
Telef. 54666

As variáveis tratadas no decurso das 430 páginas deste bem apresentado volume são: temperatura, pressão, velocidade, caudal e análise de gases e de todas elas são apresentados os instrumentos principais de uma forma simples embora suficientemente completa. O conteúdo do livro é amenizado por esquemas muito explícitos onde o facto de por vezes se adoptarem notações diferentes das correntes em Portugal não chega a constituir inconveniente.

Pena não serem estudadas outras variáveis como o nível, densidade, viscosidade e outros métodos de análise química, por vezes de grande importância na indústria.

Resta referir que este tratado se refere a parte da matéria estudada na cadeira de «Análises Industriais» do I.S.T., pelo que se torna um bom auxiliar dos alunos que estudam aquela cadeira.

J. M. N.

C. D. U. 339.32 (469) 66

1.ª Matriz portuguesa da indústria química

por *E. F. Borralho*

I.N.I.I. — Estudos, n.º 12, 1966.

Este trabalho situa-se no programa de estudos interindustriais que se estabeleceu após a conclusão dos apuramentos provisórios da 1.ª Matriz Portuguesa de Relações Interindustriais, efectuadas pelo I N.I I. e divulgadas nos finais de 1963.

Dado que os quadros input-output constituem o modo mais exaustivo de aproveitamento das fontes de informação disponíveis, a revisão dos dois sectores que, na 1.ª Matriz Portuguesa, integram a indústria química, foi feita sob a forma de quadros «input-output», cujos resultados se apresentam no presente trabalho.

Assim, aproveitando-se todos os recursos das fontes estatísticas disponíveis, ao apresentar os dois sectores da indústria química em 41 subsectores fica-se ainda com a possibilidade, para além de uma análise detalhada, de comparações com matrizes similares publicadas no estrangeiro. E o interesse de tal comparação não se torna necessário encarecer na medida em que poderá servir de valioso indicativo aos nossos empresários, com vista a uma provável melhoria dos seus esquemas de fabrico.

ARTIGOS DE REVISTAS

C. D. U. 532.528 [691.32]

Cavitating eddies and their incipient damage to concrete — *Maurice I. Kenn.*

Civil Engineering, 11-966, vol. 61, n.º 724, pág. 1404-1405.

A formação e dispersão regular de vórtices por trás de um cilindro num escoamento de um fluido é um fenómeno comum que pode dar origem a vibrações nas estruturas. De interesse adicional para o hidráulico é o facto de tal dispersão de vórtices poder persistir a altas frequências e para valores elevados do número de Reynolds, com a consequente persistência da cavitação nos escoamentos líquidos.

A existência de grandes cavidades no escoamento tem sido confirmada pela refracção de um feixe de luz estroboscópica.

Deste modo, avarias locais em superfícies vizinhas de betão podem ser provocadas com períodos de algumas horas.

As estruturas hidráulicas de betão deviam portanto ser projectadas, quando possível, especificamente com o fim de evitar a produção de zonas de pressão hidráulica muito baixa, especialmente em regiões ou camadas limites de escoamentos separados. Deste modo a cavitação pode ser evitada, e portanto anulados os prejuízos dela resultantes.

C. D. U. 535.243 : 002.56

Le spectrophotométre infrarouge UR 20 — *H. Günther, H. Büttner* e *H. Seiferth.*

Revue d'Iéna, 966, vol. n.º 2, pág. 121-126.

Este espectrofotómetro inteiramente automático é um aparelho registador de dois feixes para a zona espectral entre 40.. e 5000. cm^{-1}. Trata-se dum melhoramento do espectrofotómetro UR 10 de que conserva a simplicidade de manipulação e o automatismo.

C. D. U. 535.822.6

Le microscope de polarisation «Polmi XK» — *J. Bergner*

Rewe d'Iéna, 966, n.º 2, pág. 136-137.

Trata-se dum novo microscópio polarizador, destinado essencialmente aos estudos gerais qualitativos e quantitativos com luz planizada assim como a trabalhos mineralógicos e petrográficos.

C. D. U. 539.143.08

Microscopia nuclear — *G. R. Bishop.*

Endeavour, 5-6, vol. 25, n.º 95, pág. 89-94.

O núcleo do átomo é geralmente considerado como uma massa central densa que ocupa apenas 2×10^{-14} do volume do átomo. Este valor é deduzido das observações de Rutheford sobre a dispersão normal dum feixe de partículas α. Contudo, por diversas razões os electrões representam melhores sondas que as partículas α. Este artigo descreve experiências neste domínio utilizando electrões e os resultados obtidos.

C. D. U. 539.172.4

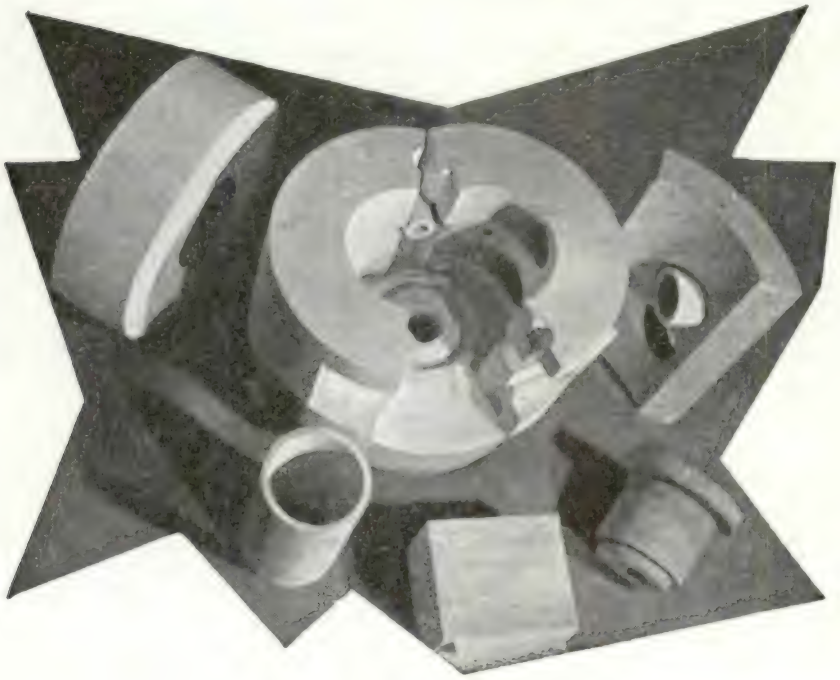
Les applications de la diffraction des neutrons — *G. E. Baca.*

Endeavour, 9-66, vol. 25, n.º 96, pág. 129-135.

A maioria dos nossos conhecimentos sobre a estrutura dos sólidos é fornecida pela difracção aos raios X, mas as informações obtidas sobre a posição dos átomos com poucos electrões — de que um dos mais importantes é o do hidrogénio — são pouco numerosos. Os neutrões são difractados pelos núcleos e podem fàcilmente «ver» os átomos de hidrogénio.

a técnica moderna emprega

BETÕES REFRACTÁRIOS



à base dos cimentos

FONDU LAFARGE

e

SECAR 250

porque são

práticos
eficientes
económicos

REFRACTÁRIOS ATÉ 1800° C
REFRACTÁRIOS ISOLANTES ATÉ 1700° C

Os nossos serviços técnicos, especializados, estão à vossa inteira disposição para estudar, sem qualquer encargo da vossa parte, a adaptação dos BETÕES REFRACTÁRIOS a todos os vossos problemas

AGUIAR & MELLO, L.DA

P. do Município, 13-1.º — LISBOA — Tel. 32 11 51/2

Neste artigo descrevem-se as aplicações de difracção dos neutrões no estudo de estruturas químicas sobretudo com ligações hidrogenadas.

C. D. U. 541.13 : 541.18 : 542.97 : 541.128

Recenti sviluppi dell'elettrochimica nel campo dell'assordimento e della catalisi — *G. Bianchi.*

Cronache di Chimica, 6-966, vol. n.º 12, pág. 10-17.

Ilustram-se os recentes desenvolvimentos referentes à estrutura da dupla camada na interfase electrodo-solução e põe-se em evidência a função desempenhada pelo solvente. Comparam-se os resultados dos estudos sobre electro-catálise e sobre adsorpção no caso da oxidação anódica do metanol e da redução catódica do oxigénio, para discutir a função desempenhada pelos iões da solução e pelos produtos intermediários da reacção, absorvidos no electrodo.

Fazem-se enfim considerações sobre a função que a electro-catálise pode ter nos processos industriais.

C. D. U. 543.257.5

Simple experiments in amperometry — Determination of acids and oxidising agents — *F. J. Feldman.*

Journal of Chemical Education, 7-966, vol. 43, n.º 7, pág. 378-379.

Descreve-se processo simples de determinar ácidos ou agentes oxidantes por amperometria.

C. D. U. 546.287

Organosilicon compounds. — XLII, N. M. R. Spectra of certain vinylsilanes — *J. Schraml* e *V. Chvalovsky.*

Colection Czechoslov. Chem. Commun., 2, 966, vol. 31, n.º 2, pág. 503-14.

São analisados espectros NMR de alguns vinilsilanos do tipo $CH_2 = CH\,Si\,Rn\,(CH_3)_{3-M}$ (em que $R = Cl$, $OSi\,(CH_3)$, $OC\,(CH_3)_3$, OC_2H_5) e do Vinil-Di (t-Butoxi) clorosilano, e os resultados discutidos em termos de ligações $(P\text{-}d)_\pi$.

C. D. U. 547.514.721

Electronic structure of non-alternant hydrocarbons; their analogues and derivatives (VI)-An HMO study of ions of the cyclopentadienyl series — *J. Michl* e *R. Zanradvik.*

Collection Czechoslov. Chem. Cmonun, 4, 966, vol. 31, n.º 4, pág. 1475-1482.

A teoria dos orbitais moleculares de Hückel (HMO) foi usada para estudar um grupo de quinze cadeias não alternantes da série ciclopentadienil.

C. D. U. 548.3

Voids in a cristal structure of identical spheres — *S. W. Salsburg.*

Journal of Chemical Education, 7-966, vol. 43, n.º 7, pág. 353-357.

Este artigo é dedicado aos professores de química-física que tem dificuldades em desenhar no quadro boas projecções tridimensionais de estruturas cristalinas. O seu método é baseado no poliedro de Vorenoi que nos dá um meio de estudar os vazios duma estrutura cristalina, classificando-os de acordo com o seu tamanho.

C. D. U. 553.98 : 547.912

Utilización de esquistos como fuente de hidrocarburos — *R. F. Beltramino.*

Ingenieria Industria, 9-966, vol. n.º 376, pág. 93-94.

No Brasil está-se trabalhando no sentido de aproveitar os xistos existentes no território para obter hidrocarbonetos susceptíveis de um aproveitamento semelhante aos do petróleo.

C. D. U. 616 - 001.28/29 : 614.898 (460)

Protecção contra radiações em Portugal — *C. Cacho, J. P. Galvão* e *J. S. Raposo.*

LFEN - Documentos, n.º 55.

Trabalho apresentado no 1.º Congresso Luso-Brasileiro de Radiologia. Os autores descrevem a evolução da protecção contra radiações em Portugal e por fim a estrutura actualmente existente, os métodos praticados e os resultados obtidos.

C. D. U. 621.039 + 311 (4)

Evolucion en el aprovisionamiento de energia a Europa Occidental — *J. M. Pertierra.*

Ion, 11-966, vol. 26, n.º 304, pág. 631-640.

C. D. U. 621.398 : 621—135

Dispositif de télémesures sur turbomachines tournant à 3000 t/mn — *S. Béhar, G. Malhoustre* e *J. M. Rata.*

Electricité de France, 3-966, n.º 15, pág. 33-43.

O artigo trata dum método de medida extensiométrica em máquinas rotativas aplicado à medida dum binário entre uma turbina e um alternador.

O principio da medição consiste em modular em frequência uma subportadora veiculada ela própria por uma portadora de alta frequência, propagando-se entre uma antena rotativa e uma antena fixa.

C. D. U. 621.74 : 669

Tratamento químico dos metais em fusão - *B. M. Parfitt.*

Fundição — Boletim A. P. F., n.º 12, 1966, pág. 15.

O autor estuda nesta comunicação, amplamente ilustrada, diversos tipos de tratamentos químicos empregados na fundição de metais não ferrosos: ligas de cobre (excepto latões), latões, bronze de alumínio, bronze-maganês, bronze-silício, bronze com chumbo, cobre de alta condutibilidade, bronze fosforoso, ligas leves e fundição em coquilha de alumínio. Descrevem-se ainda processos especializados para, nas ligas leves, se proceder à desgaseificação e à afinação do grão.

carboneto de cálcio
cianamida calcica
Fábricas: Canas de Senhorim
ferro gusa
ferro ligas
ferro silício
ferro manganês
silico-manganês
CP
FE
COMPANHIA PORTUGUESA DE FORNOS ELÉCTRICOS
Capital 60 MIL CONTOS
S A R L
Largo de S. Carlos, 4 Lisboa · 2

C. D. U. 621.744

A precisão dimensional na fundição — posicionamento das caixas de moldação — (continuação) — *J. Acúrcio.*

Fundição — Boletim A. P. F., n.º 8, 1966 pág. 41.

No prosseguimento do artigo anterior, inserido no n.º 7 de «Fundição», o autor aprecia as vantagens e os inconvenientes do sistema de pernos redondos em casquilhos de furo redondo.

Aborda, já no final, o sistema que adopta o chamado casquilho oval, em substituição do redondo

C. D. U. 621.892 : 629.113

Características de los lubricantes y tipos de servicios en automoción — *F. L. Miguel, L. M. Cordón* e *A. Mompeán.*

Iom, 9-966, vol. 26, n.º 302, pág. 497-510

Os autores referem-se à interpretação das características físico-químicas dos lubrificantes perante as condições de utilização, aos tipos do serviço e lubrificantes mais aptos para cada serviço e aos níveis de qualidade dos mesmos.

C. D. U. 624.075.001

Etat actuel du problème du flambement des barres en acier à la lumière des travaux de la Comission VIII (Instabilité) de la Convention Européenne de la Construction Métallique — *Ch. Massonnet.*

Acier-Stahl-Steel, 1-967 31.º ano, n.º 10, pág. 459-466.

O objectivo da Comissão VIII é estabelecer as regras europeias comuns de dimensionamento de elementos em perigo de instabilidade, com o fim de fazer beneficiar todas as nações aderentes à Convenção de um esforço científico colectivo

Expõe-se o programa de trabalhos das Sub-Comissões do Grupo VIII, a saber, para a Sub Comissão «Ensaios» o estabelecimento de programa coordenado de ensaios e para a Sub-Comissão «Teoria» o desenvolvimento duma teoria coerente, económica e simples da estabilidade das barras comprimidas.

C. D. U. 625.75 : 625.721.8.003.1

Bases de um método racional para el dimensionamento de refuerzos de firmes flexibles, basado en la medida de la deformación puntual bajo un eje cargado — *Sandro Rocci.*

Informes de la Construcción, 10-966, 19.º ano, n.º 184, pág. 93-103.

O artigo é uma descrição qualitativa dos factores que intervêm no comportamento do revestimento de uma estrada e das relações existentes entre esses factores. Estabelece-se um esquema funcional cujo objectivo é a redução a um mínimo do custo total (execução + manutenção + exploração) duma estrada. Estabelecem-se ainda as bases para a criação de um método de dimensionamento dos reforços para revestimentos flexíveis.

C. D. U. 658.012.2

Presentation of critical path analysis results using the cascade activity numbering (can) Method — *Peter F. Miller* e *Ian D. Cordiner.*

Civil Engineering, 11-966, vol. 61, n.º 724, pág. 1367-1370.

Um dos principais elementos que falta nos sistemas do Método do Caminho Crítico, é uma comunicação efectiva da análise ao utilizador. A Carta Gantt é ainda popular porque apresenta o seu conteúdo em termos compreensíveis. As tentativas para introduzir uma escala de tempos nestes diagramas geralmente não dão resultados.

Apresenta-se um método novo — «Método da numeração da actividade em cascata», que é essencialmente uma forma disciplinada do diagrama clássico.

C. D. U. 658.516 : 389.64

A normalização e a qualidade — *António de Almeida Júnior*

Fundição — Boletim A. P. F., n.º 12, 966, pág. 31.

O autor aponta o facto de que a normalização e a qualidade não são termos sinónimos, se bem que seja impossível obter-se nas fabricações em série qualidade sem normalização. Conclui, esquemàticamente, que normalização e qualidade são duas funções complementares cuja união é um dos maiores trunfos que as empresas devem saber manobrar para fazer frente à concorrência crescente existente nos mercados actuais.

C. D. U. 66.004 5

Mantenimiento en la industria quimica — *V. Smirnoft.*

Ingenieria Industrie, 9-966, n.º 376, pág. 85-92.

Na literatura sobre manutenção, sobretudo de origem norte-americana, notam-se importantes diferenças entre os diversos autores na interpretação de termos tais como manutenção correctiva, manutenção preventiva e ainda outros. Assim parece justificado o tentar estabelecer-se uma classificação própria e usar uma terminologia adaptada. É o que o autor faz neste artigo.

C. D. U. 66.049.1.005

El evaporador de placas: Um nuevo e revolucionário sistema de concentración (Cont.). — *L. Manzano de la*

Ion, 9-966, vol. 26, n.º 302, pág. 511-519.

C. D. U. 661.71 : 665.5

Los hidrocarburos aromáticos y el petróleo — *M. J. Tovar.*

Dyna, 6-966, vol. 41, n.º 6, pág. 357-363.

O autor começa por classificar os produtos petroquímicos após o que se refere à formação de hidrocarbonetos aromáticos, à respectiva separação e isolamento, às transformações que podem sofrer e aos derivados deste tipo de hidrocarbonetos.

LISTA CLASSIFICADA DE ANÚNCIOS

Neste número continua a «Técnica» a sua secção de publicidade — a *lista classificada de anúncios* — destinada a facilitar a procura por parte dos clientes.

Estas páginas amarelas ficam abertas aos nossos leitores, que nelas podem anunciar a sua firma e endereço, ao preço de 50$00 por número. Quanto aos nossos anunciantes, é com muito gosto que lhes concedemos grátis a inscrição na lista.

CONSTRUÇÃO CIVIL

CONSTRUTORES CIVIS

— **Construções Técnicas, Lda.**
P. do Município, 13-3.º — Tel. 36 65 06

— **Escodel**
Rua Ferreira Lapa, 42, 1.º D. — Lisboa.

— **Fundações Franki**
R. Braamcamp, 13-3.º — Lisboa — Tel. 73 41 12.

— **Soc. Const. Amadeu Gaudencio, Ld.ª**
R. Dr. Alexandre Braga, 4-A — Lisboa
Telef. 4 31 91 — 92 — 93.

— **Soc. de Pré-Fabricação e Obras Gerais Novobra**
Av. Estados Unidos da América, 100-5.º D
— Telef. 77 48 32 / 76 64 46 — Lisboa 5

ESCAVADORAS

— **Fassio, Lda.**
R. Jardim do Regedor, 20—Lisboa. Tel. 36 19 02

— **Guedes & Almeida**
Rua Aurea, 181-2.º— Tel. 32 78 45 — Lisboa 2

— **S. T. E. T. — Soc. Técnica de Equipamentos e Tractores, Ld.ª**
Prior Velho — Sacavém — Tel. 2 51 00 01/4.

— **Monteiro Gomes, Ld.ª**
Rua Cascais, 47 (Alcântara).

FUNDAÇÕES

— **Construções Técnicas, Lda.**
Pr. do Município, 13-3.º — Tel. 36 65 06

— **Empresa de Sondagens e Fundações Teixeira Duarte, Ld.ª**
Pr. da Figueira, 18, 3.º — Lisboa — Tel. 36 27 95.

— **Empresa Ultramarina de Sondagens e Fundações**
R. S. Pedro de Alcantara, 1 — Tel. 32 46 93 e 21 32 56 — Lisboa — Luanda — Lourenço Marques — Beira.

— **Fundações Franki**
R. Braamcamp, 13-3.º — Lisboa — Tel. 73 41 12.

— **Johann Keller**
R. dos Bem Lembrados - Cascais — Tel. 28 01 46

— **Sondagens e Fundações, A. Cavaco, Lda.**
R. Rodrigo da Fonseca, 62-r/c — Lisboa 1
Tel. 55 38 73 — 5 95 62 — 73 35 45.

— **Sondagens Ródio**
Rua de S. Bento, 644-3.º — Lisboa
Tel. 68 80 96/7/8

— **Sopecate**
R. do Arsenal, 146, 2. — Lisboa.

IMPERMEABILIZAÇÃO

— **Empresa de Produtos Asfálticos**
R. Filipe Folque, 10-1.º — Lisboa — Tel. 73 01 56.

INSTRUMENTOS DE PRECISÃO

— **Wild Portugal, Ld.ª**
Praça das Águas Livres, 8, s/l 6 — Lisboa 2 — Tel. 68 11 27.

ISOLAMENTO TÉRMICO E ACÚSTICO

— **ISOLA**
Av. António Augusto de Aguiar, 17, 2.º e 3.º esq.
Tel. 53 71 91 — Lisboa.

— **SETH, Ld.ª**
R. Filipe Folque, 10-1.º — Lisboa — Tel. 73 01 56

MOBILIÁRIO

— **Fábrica Portugal**
R. Febo Moniz

SONDAGENS

— **Construções Técnicas, Lda.**
Pr. do Município, 13-3.º — Tel. 36 65 06

— **Empresa de Sondagens e Fundações Teixeira Duarte, Ld.ª**
Praça da Figueira, 18- 3.º D. - Lisboa
Tel. 36 27 95.

— **Empresa Ultramarina de Sondagens e Fundações**
R. S. Pedro de Alcântara, 1 — Tel. 32 46 93 e 21 13 56 — Lisboa — Luanda — Lourenço Marques — Beira.

— **Fundações Franki**
R. Braamcamp, 13-3.º — Lisboa — Tel. 73 41 12

— **Johann Keller**
R. dos Bem Lembrados - Cascais — Tel. 28 01 46

— **Sondagens e Fundações, A. Cavaco, Lda.**
R. Rodrigo da Fonseca, 62-r/c — Lisboa 1
Tel. 55 38 73 — 5 95 67 — 73 35 45.

— **Sondagens Ródio, Ld.ª**
Rua de S. Bento, 664-3.ª — Lisboa
Tel. 68 80 96/7/8.

— **Sopecate**
R. do Arsenal, 176,-2.º — Lisboa.

CONSTRUÇÕES METALO-MECANICAS

CONSTRUTORES METALO-MECÂNICOS

— **Construções Metalo-mecânicas MAGUE, Ld.ª** — Alverca

— **Jayme da Costa, Ld.ª**
R. dos Correeiros, 14 — Lisboa — Tel. 32 70 35.
Praça da Batalha, 12 — Porto — Tel. 2 28 12.
Cx. Postal 5174 — Luanda — Tel. 47 43.

— **LISNAVE**
Rocha do Conde de Óbidos — Lisboa

— **Sociedade Industrial Metalúrgica**
R. de S. Tiago, 1

REPARAÇÕES E CONSTRUÇÕES NAVAIS

LISNAVE
Rocha Conde de Óbidos — Lisboa

EQUIPAMENTO ELECTRICO

— **AEG — Lusitana de Electricidade**
R. João Saraiva, 4-Tel. 71 11 71/71 40 01-Lisboa.

— **ASEA**
Rua de Artilharia Um, 104-4.º Dt. — Lisboa — Tel. 68 90 17/8/9.
R. do Campo Alegre, 144, Porto — Tel. 6 21 06/9

— **Electrotécnicos Reunidos**
Avenida João XXI, 64 — Lisboa.

— **Jayme da Costa, Ld.ª**
R. dos Correeiros, 14 — Lisboa — Tel. 32 70 35
Praça da Batalha, 12 — Porto — Tel. 2 28 12.
Cx. Postal 5174 — Luanda — Tel. 47 43.

— **Secheron Portuguesa — Porto**

— **Soc. de Elec. Brown Boveri**
R. Sá da Bandeira, 481-2.º — Tel. 2 34 11 — Porto

— **Sociedade Michäelis de Vasconcelos, Ld. — Oerlikon**
Av. Marquês de Tomar, 94 — Lisboa.
P. da Liberdade, 114 — Porto.

— **Standard Eléctrica**
Av. da Índia — Lisboa.

— **União Eléctrica Portuguesa**
R. Alexandre Herculano, 244 — Porto.
R. Rosa Araújo, 35 — Lisboa.

BATERIAS

— **TUDOR — Soc. Port. de Acumuladores**
Av. Fontes Pereira de Melo, 12
Tel. 5 19 47 — Lisboa.

DISTRIBUIÇÃO DE ENERGIA

— **União Eléctrica Portuguesa**
R. Alexandre Herculano, 244 — Porto.
R. Rosa Araújo, 35 — Lisboa.

ELÉCTRODOS

— **Electro-Arco, Ld.ª**
R. Silva Carvalho, 239 — Lisboa — Tel. 68 36 49.
R. do Bolhão, 216 — Porto — Tel. 2 12 77.

INSTALAÇÕES

— **Isolux, Lda.**
R. Gonçalves Crespo, 33, 3.º — Lisboa
R. de Sá da Bandeira, 551, 4.º — Porto.

— **Jayme da Costa, Ld.ª**
R. dos Correeiros, 14 — Lisboa — Tel. 32 70 35.
Praça da Batalha, 12 — Porto — Tel. 2 28 12.
Cx. Postal 5174 — Luanda — Tel. 47 43.

— **Secheron Portuguesa — Porto**

ISOLAMENTOS

— **Empresa Electro-Cerâmica, S.A.R.L.**
L. Barão de Quintela.

SOLDADURAS

— **Electro Arco**
R. Silva Carvalho, 239 — Lisboa
R. do Bolhão, 216 — Porto

TELECOMUNICAÇÕES

— **A E G Lusitana de Electricidade**
R. João Saraiva, 4—Tel. 71 11 71/71 40 10-Lisboa

— **Empresa Técnica de Equipamentos Eléctricos, S.A.R.L.**
R. Rodrigo da Fonseca, 110, r/c — Lisboa — Tel. 68 60 72.
R. Sá da Bandeira, 766-1.° E — Porto — Tel. 2 48 18

— **Standard Eléctrica, S.A.R.L.**
Av. da Índia — Lisboa.

EQUIPAMENTO INDUSTRIAL

— **DEMAG — Soc. Comercial Romar**
Trav. da Galé, 9 — Tel. 63 56 70 — Lisboa.
Santa Iria de Azoia

— **Fassio, Lda.**
R. Jardim do Regedor, 20—Lisboa. Tel. 36 19 02

— **MEC — Fábrica de Aparelhagem Industrial, Lda.**

— **S. T. E. T.—Soc. Técnica de Equipamentos e Tratores, S. A. R. L.**
Prior Velho—Sacavem—Tel. 2510001/4.

BOMBAS

— **CIDEX — Comércio Internacional e Representações Industriais**
Av. Casal Ribeiro, 46-2.°-Tel. 73 53 07-Lisboa 1

CORRENTES

— **Harker Summer**
L. Corpo Santo, 18 — Tel. 32 48 23 — Lisboa.

MÁQUINAS-FERRAMENTAS

— **Soc. Portuguesa de Válvulas**
R. Academia de Ciências, 5 — Lisboa.
Tel. 3 17 10.

INDÚSTRIAS QUÍMICAS

— **Quimicor**
R. Sociedade Farmaceutica, 3 — Lisboa.

FELTROS

— **FANAFEL — Fábrica Nacional de Feltros Industriais**
Estrada de S. João — Ovar

LUBRIFICANTES

— **B. P.**

TÊXTEIS

— **FANAFEL — Fábrica Nacional de Feltros Industriais, Ld.ª**
Estrada de S. João — Ovar.

LIVROS TECNICOS

—**TECNICA**
Avenida Rovisco Pais — Lisboa
Tel. 77 54 49

MATERIAIS DE CONSTRUÇÃO

AÇOS ESPECIAIS

— **A. Johnson & C.ª (Portugal), Ld.ª**
P. José Fontana, 11-1.° — Lisboa — Tel. 53 70 15/ /6/7/8.
R. Dr. António Granjo, 160/168-Porto-Tel. 5 46 69

— **Companhia Portuguesa de Trefilaria**
R. do Instituto Industrial, 18-1.°, Dt.° — Lisboa
Tel. 67 12 24/5.

— **Companhia Portuguesa de Fornos Electricos**
L. S. Carlos, 4-2.°

— **Heliaço**
R. S. Julião, 41-4.° — Tel. 36 78 17 — Lisboa.

BETÃO

— **Aguiar e Melo, L.da**
P. do Município, 13-1.°-Dt.° — Tel. 32 11 51/2 — Lisboa.

— **Companhia Portuguesa de Trefilaria**
R. do Instituto Industrial, 18-1.°, Dt.° — Lisboa
Tel. 67 12 24/5.
Lisboa 1

— **Heliaço**
R. S. Julião, 41-4.º — Tel. 36 78 17 — Lisboa.

— **Sociedade Portuguesa CAVAN**
R. de D. Estefânia, 94-A — Lisboa — Tel. 4 78 12 e 5 01 29.

CIMENTOS

— **Aguiar e Melo, L.da**
P. do Município, 13-1.º-Dt.º — Tel. 32 11 51/2 — Lisboa.

— **CIBRA — Cimentos Brancos**
Tv. do Corpo Santo, 15 — Lisboa — Tel. 32 04 64.
R. do Bonjardim, 205 — Porto — Tel. 2 57 79.

— **Empresa de Cimentos de Leiria**
R. Braamcamp, 7 — Lisboa — Tel. 5 91 61/66.

— **Secil**
R. do Comércio, 156—Lisboa 2 —Tel. 32 82 01/2/3

ARTIGOS DE ESCRITÓRIO

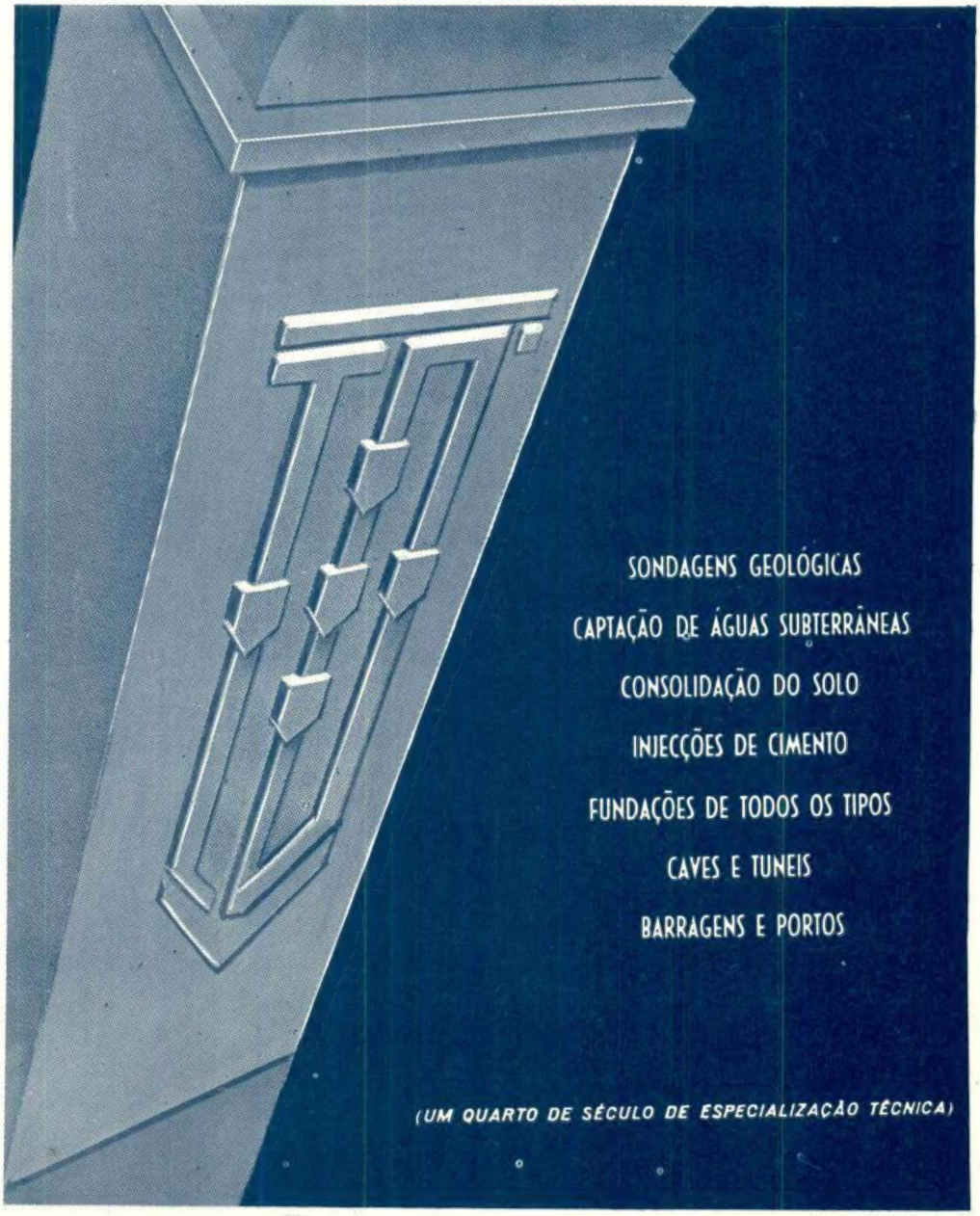
— **J. J. Silva & Irmão, Lda.**
Rua Silva Carvalho, 232-B — Lisboa
Tel. 65 27 50 / 68 06 71

Empresa de Sondagens e Fundações

TEIXEIRA DUARTE, L.DA

AV. DA REPÚBLICA, 42, 8.º
TELEFS. 77 70 86/7 e 77 12 65

LISBOA



Offset de